

# **CFD-Simulation der dynamischen Eigenschaften großer Kerosin- und Heptan-Poolflammen**

## **Dissertation**

zur Erlangung des akademischen Grades eines  
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

Fachbereich Chemie  
der Universität Duisburg-Essen

vorgelegt von

**Christian Kuhr**

aus

Hengelo, Niederlande

Essen, 2008



Referent: Prof. Dr. Axel Schönbucher

Korreferent: Prof. Dr. Ulrich Hauptmanns

Datum der Disputation: 21.08.2008





## **Erklärung**

Hiermit erkläre ich, dass ich die Arbeit selbständig verfasst habe. Die verwendeten Quellen sowie die verwendeten Hilfsmittel sind vollständig angegeben.

Duisburg, 09.06.08



## **Vorwort**

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Technische Chemie I der Universität Duisburg-Essen, Campus Essen.

Herrn Prof. Dr. Axel Schönbucher, dem Leiter des Institutes für Technische Chemie I an der Universität Duisburg-Essen, danke ich ganz besonders für die Überlassung des Themas, die stete wissenschaftliche Betreuung sowie für die kritische Durchsicht der Arbeit.

Herrn Prof. Dr. Ulrich Hauptmanns, dem Leiter der Abteilung Anlagentechnik und Anlagensicherheit am Institut für Apparate- und Anlagentechnik an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, gilt mein Dank für die Bereitschaft zur Übernahme des Korreferates.

Ich danke allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Instituts für Technische Chemie I für die konstruktive Unterstützung und stets freundliche Arbeitsatmosphäre. Frau Dipl.-Phys. Iris Vela sowie den Herren Dr. Wolfgang Laarz, Dipl.-Ing. Markus Gawlowski und Dipl.-Chem. Markus Frilling danke ich für die zahlreichen anregenden Diskussionen. Herrn Dipl.-Phys. Peter Sudhoff danke ich für die tatkräftige Unterstützung bezüglich des Rechenclusters.

Nicht zuletzt möchte ich mich besonders bei meinen Eltern bedanken, die mich während des gesamten Studiums und auch während dieser Arbeit sehr unterstützt haben.



# Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung .....	xiii
Symbolverzeichnis .....	xvii
1 Einleitung .....	1
2 Experimentelle und theoretische Grundlagen von Poolflammen .....	3
2.1 Poolflammen als Schadenfeuer .....	3
2.2 Physikalisch-chemische Vorgänge.....	6
2.3 Einflussgrößen und Geometrie.....	9
2.3.1 Massenabbrandrate und Abbrandgeschwindigkeit.....	9
2.3.2 Flammenform .....	12
2.3.2.1 Basisdurchmesser .....	12
2.3.2.2 Flammenlänge .....	13
2.3.2.3 Flammenneigung .....	15
2.3.2.4 Flammen-Drag .....	16
2.4 Flammentemperaturen.....	17
2.5 Strömungsgeschwindigkeiten.....	21
2.6 Ruß .....	23
2.7 Kohärente Strukturen .....	25
2.7.1 Helle Verbrennungszone .....	25
2.7.2 Rußballen .....	26
2.7.3 Hot spots.....	26
2.8 Wärmestrahlung .....	27
2.8.1 Mittlere spezifische Ausstrahlung.....	27
2.8.1.1 Konventionelles und modifiziertes Zylinderflammen-Strahlungsmodell .....	27
2.8.1.2 Zweizonen-Strahlungsmodell.....	29
2.8.1.3 Organisierte Strukturen-Strahlungsmodelle OSRAMO II und OSRAMO III..	30
2.8.2 Mittlere Bestrahlungsstärke.....	34
2.8.2.1 Punktquellen-Strahlungsmodell .....	34
2.8.2.2 Einstrahlzahlen .....	35
2.9 Klassifizierung von Flammenmodellen .....	37
2.9.1 Semi-empirische Modelle .....	37
2.9.2 Zonenmodelle.....	38
2.9.3 Feldmodelle .....	38
2.9.4 Integralmodelle.....	38
2.9.5 CFD-Modelle .....	39
3 Experimentelle Untersuchungen .....	41
3.1 Pools und Versuchsgelände.....	41
3.2 Fotografische Aufnahmetechnik .....	42

3.3 Infrarot-Thermographiesystem.....	42
3.4 Radiometer .....	43
3.5 Windmessstation .....	44
4 Darstellung und Diskussion des CFD-Codes CFX .....	45
4.1 Einführung in die Modellbildung.....	45
4.2 Differentielle Bilanzgleichungen und Zustandsgleichung .....	47
4.2.1 Allgemeine Formulierung der differentiellen Bilanzgleichung .....	47
4.2.2 Massenbilanz .....	48
4.2.3 Impulsbilanz .....	48
4.2.4 Energiebilanz.....	50
4.2.5 Speziesbilanzen .....	50
4.2.6 Zustandsgleichung.....	51
4.3 Submodelle.....	51
4.3.1 Turbulenzmodelle.....	51
4.3.1.1 Eigenschaften turbulenter Strömungen .....	51
4.3.1.2 Reynolds-gemittelte Modelle .....	53
4.3.1.3 Large-Eddy-Simulationen .....	58
4.3.2 Verbrennungsmodelle .....	60
4.3.2.1 Speziesquellterme aufgrund chemischer Reaktionen.....	60
4.3.2.2 Das Eddy-Dissipations-Modell am Beispiel der Kerosin-Verbrennung .....	61
4.3.2.3 Das Flamelet-Modell am Beispiel der Heptan-Verbrennung.....	62
4.3.3 Rußmodellierung.....	67
4.3.3.1 Rußmodellierung mit dem Magnussen-Modell.....	67
4.3.3.2 Rußmodellierung mit dem Lindstedt-Modell.....	70
4.3.4 Wärmestrahlungsmodelle.....	73
4.3.4.1 Fotometrische Größen und Strahlungsbilanzgleichung .....	73
4.3.4.2 Strahlungsmodellierung mit der Monte-Carlo Methode .....	76
4.3.4.3 Strahlungsmodellierung mit der Diskreten Transfermethode .....	77
4.4 Diskretisierungs- und numerische Lösungsverfahren .....	78
4.4.1 Finite Volumen Methoden .....	78
4.4.2 Gekoppelter Löser und Mehrgitterverfahren.....	81
5 Durchführung der Simulationen.....	85
5.1 Übersicht .....	85
5.2 Erstellung der Geometrie und Gittergenerierung mit ICEM CFD .....	86
5.2.1 Geometrie und Gitter für die Kerosin-Poolflamme mit $d = 16 \text{ m}$ .....	86
5.2.2 Geometrie und Gitter für die Kerosin-Poolflammen bei Annahme einer Spiegelsymmetrie .....	87
5.2.3 Geometrie und Gitter für die Heptan-Poolflamme bei Annahme einer Spiegelsymmetrie .....	88
5.3 Anfangs- und Randbedingungen sowie Zeitschritte .....	91
5.4 Wahl und Konfiguration der Submodelle .....	93
5.4.1 Turbulenzmodell .....	93
5.4.2 Verbrennungsmodelle .....	94

5.4.2.1 Modellierung der Kerosin-Verbrennung mit dem Eddy-Dissipations-Modell .	94
5.4.2.2 Modellierung der Heptan-Verbrennung mit dem Flamelet-Modell.....	94
5.4.3 Rußmodelle .....	94
5.4.3.1 Rußmodellierung mit dem Magnussen-Modell.....	94
5.4.3.2 Rußmodellierung mit dem Lindstedt-Modell.....	95
5.4.4 Wärmestrahlungsmodell und Absorptionskoeffizient.....	95
5.4.4.1 Berechnung des Absorptionskoeffizienten bei der Modellierung der Kerosin-Poolflammen .....	95
5.4.4.2 Berechnung des Absorptionskoeffizienten bei der Modellierung der Heptan-Poolflamme .....	96
5.4.4.3 Berechnung der Bestrahlungsstärke .....	97
6 Ergebnisse und Diskussion.....	99
6.1 Bemerkungen zur Validierung .....	99
6.2 Transiente Felder.....	100
6.2.1 Temperaturfelder.....	100
6.2.2 Strömungsfelder .....	106
6.2.3 Massenanteile und Reaktionsraten bzw. Mischungsbruch.....	108
6.2.3.1 Massenanteile der Spezies und Reaktionsraten in den Kerosin-Poolflammen .	108
6.2.3.2 Mischungsbruch und Massenanteile ausgewählter Spezies in der Heptan-Poolflamme .....	113
6.2.4 Rußfelder und Absorptionskoeffizienten .....	113
6.2.5 Dichtefelder und Auftriebskräfte .....	118
6.2.6 Spezifische Ausstrahlung .....	119
6.3 Transiente Bestrahlungsstärken.....	122
6.4 Pulsationsfrequenzen.....	124
6.5 Zeitlich gemittelte Felder .....	128
6.5.1 Temperaturfelder.....	128
6.5.2 Temperaturprofile.....	129
6.5.3 Strömungsgeschwindigkeiten.....	133
6.5.4 Geschwindigkeitsprofile.....	135
6.5.5 Speziesmassenanteile .....	136
6.5.6 Rußvolumenanteile.....	138
6.6 Flammenlängen .....	140
6.7 Mittlere spezifische Ausstrahlung.....	141
6.8 Mittlere Bestrahlungsstärke.....	143
7 Schlussfolgerungen und Ausblick .....	145
Literaturverzeichnis.....	147
Lebenslauf .....	155
Publikationsliste .....	157





## Zusammenfassung

Es werden experimentelle und theoretische Erkenntnisse zu charakteristischen Eigenschaften und zur Dynamik großer Poolflammen flüssiger Kohlenwasserstoffe für verschiedene Pooldurchmesser dargestellt. Insbesondere werden Massenabbrandraten, Abbrandgeschwindigkeiten, Flammenlängen, -formen und -temperaturen sowie Strömungsgeschwindigkeiten diskutiert. Es folgt eine Betrachtung der Rußbildungsmechanismen sowie der kohärenten dissipativen Strukturen als wichtige Einflussgrößen auf die sicherheitstechnisch besonders relevante spezifische Ausstrahlung (SEP) und Bestrahlungsstärke (E).

Anhand von Messungen mit einem IR-Thermographiesystem in Verbindung mit VIS-Filmaufnahmen können den kohärenten Strukturen hot spot und Rußballen in Poolflammen verschiedener Brennstoffe wie Kerosin, Diesel, Pentan und JP4 bestimmte Temperaturbereiche und spezifische Ausstrahlungsbereiche zugeordnet werden. Die spezifischen Ausstrahlungen SEP der Flammen zeigen eine starke Abhängigkeit vom Pooldurchmesser  $d$  und vom Brennstoff. Die Flammen weisen außerdem Pulsationsfrequenzen auf, die mit zunehmendem Pooldurchmesser entsprechend  $f(d) = 1.51d^{-0.58}$  abnehmen. Die Abhängigkeit der Bestrahlungsstärke  $\bar{E}(\Delta y/d)$  vom horizontalen relativen Abstand  $\Delta y/d$  wurde mit Radiometern für verschiedene Brennstoffe gemessen.

Es werden CFD-Simulationen von Kerosin-Poolflammen mit  $d = 10$  m,  $d = 16$  m und  $d = 20$  m sowie von einer Heptan-Poolflamme mit  $d = 6$  m unter Verwendung des kommerziellen Softwarepaketes ANSYS CFX durchgeführt. Die Lösungsalgorithmen des CFD-Codes und die in den CFD-Simulationen verwendeten Submodelle werden diskutiert. Die Kerosin-Poolflammen werden mit einem Globalmechanismus und dem Eddy Dissipations Modell beschrieben, die Rußmodellierung erfolgt mit dem Magnussen-Rußmodell. In der Simulation der Heptan-Poolflamme wird die Verbrennung mit einem Flamelet-Modell berechnet und zur Rußmodellierung wird das Lindstedt-Rußmodell implementiert. Die Turbulenzmodellierung erfolgt jeweils mit dem Standard-k- $\epsilon$ -Modell inklusive Auftriebsterm, die Modellierung der Strahlung erfolgt jeweils mit der Monte Carlo Methode.

In der Simulation der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 16$  m wird ein rotationssymmetrisches Rechengitter mit 7548 hexaedrischen Zellen verwendet. Die Simulation der Kerosin-Poolflammen mit  $d = 10$  m und  $d = 20$  m erfolgt bei spiegelsymmetrischen Gittern mit 520756 bzw. 559136 hexaedrischen Zellen. Die Zeitschritte betragen bei den drei Kerosin-Poolflammen jeweils  $\Delta t = 0.05$  s. Die Diskretisierung der Geometrie für die Heptan-Poolflamme erfolgt bei einem spiegelsymmetrischen Gitter mit 158300 hexaedrischen Zellen, und einem Zeitschritt von  $\Delta t = 0.01$  s.

Es werden in den Kerosin-Poolflammen momentane Reaktionsgeschwindigkeiten und Massenanteile der Edukte Kerosin und Sauerstoff sowie der Produkte Kohlenstoffdioxid und Wasser vorhergesagt. In der Heptan-Poolflamme werden der Mischungsbruch und 59 daraus resultierende Spezies berechnet. In den Poolflammen beider Brennstoffe zeigen die berechne-

ten transienten Felder einen Zusammenhang zwischen den Spezies, ihren chemischen Reaktionen und der turbulenten Strömung. Vom Poolrand steigen periodisch Wirbelstrukturen auf, in denen die von der Pooloberfläche aufsteigenden Brennstoffdämpfe mit dem Luftsauerstoff vermischt werden. Innerhalb eines Wirbels wird der Brennstoff durch chemische Reaktionen verbraucht, so dass dort die Temperaturen und folglich auch die Auftriebskräfte immer mehr abnehmen bis der Wirbel schließlich vollständig dissipiert. Beim Aufsteigen eines Wirbels kommt es in dem darunter liegenden Bereich zur Luftansaugung (Entrainment), wodurch sich die Flamme dort zunächst einschnürt. Die Vermischung der Luft mit den aufsteigenden Brennstoffdämpfen führt zu einer heißen Verbrennungszone. Beim Aufsteigen werden die heißen Flammengase durch die Umgebungsluft teilweise abgelenkt und es entstehen neue Wirbelstrukturen. Die Wirbel bewirken einen radialen Wärmetransport und führen zur lokalen Verbreiterung der Flamme, das periodische Aufsteigen der Wirbelstrukturen führt also zu einer Pulsation der Flamme. Die aus den Simulationen der Kerosin-Poolflammen vorhergesagten pooldurchmesserabhängigen Pulsationsfrequenzen liegen bei  $f(d = 10 \text{ m}) = 0.43 \text{ Hz}$ ,  $f(d = 16 \text{ m}) = 0.32 \text{ Hz}$  und  $f(d = 20 \text{ m}) = 0.28 \text{ Hz}$  und stimmen gut mit den experimentellen Ergebnissen überein.

Die Pulsation der Flamme führt zu zeitabhängigen Strömungs- und Temperaturfeldern. Die aus den simulierten transienten Strömungsfeldern berechneten mittleren Strömungsgeschwindigkeiten sind pooldurchmesserabhängig. Die Maxima der mittleren axialen Geschwindigkeiten entlang der Flammenachse liegen in den Kerosinflammen bei  $\bar{u}_{x,\max}(d = 10 \text{ m}) = 17 \text{ m/s}$ ,  $\bar{u}_{x,\max}(d = 16 \text{ m}) = 25 \text{ m/s}$  und  $\bar{u}_{x,\max}(d = 20 \text{ m}) = 25 \text{ m/s}$  und in der Heptanflamme bei  $\bar{u}_{x,\max}(d = 6 \text{ m}) = 13.5 \text{ m/s}$ . Außerdem treten axiale Rückströmungen auf mit maximalen Geschwindigkeiten zwischen  $\bar{u}_{x,\max}(d = 10 \text{ m}) = -1.8 \text{ m/s}$ ,  $\bar{u}_{x,\max}(d = 16 \text{ m}) = -6.9 \text{ m/s}$ ,  $\bar{u}_{x,\max}(d = 20 \text{ m}) = -9.8 \text{ m/s}$  für die Kerosin-Poolflammen sowie  $\bar{u}_{x,\max}(d = 6 \text{ m}) = -4.0 \text{ m/s}$  für die Heptan-Poolflamme. Auch die Maxima der mittleren Flammentemperaturen hängen vom Pooldurchmesser ab. Sie betragen im Fall der Kerosinflammen  $\bar{T}_{\max}(d = 10 \text{ m}) = 1176 \text{ K}$ ,  $\bar{T}_{\max}(d = 16 \text{ m}) = 1111 \text{ K}$  und  $\bar{T}_{\max}(d = 20 \text{ m}) = 1277 \text{ K}$  und in der Heptanflamme  $\bar{T}_{\max}(d = 6 \text{ m}) = 1046 \text{ K}$ . Die axialen Profile in den drei Kerosin-Poolflammen zeigen sowohl für die Strömungsgeschwindigkeiten als auch für die Temperaturen eine recht gute Übereinstimmung mit empirischen Korrelationen von McCaffrey. Lediglich die simulierten axialen Profile der Heptan-Poolflamme liegen etwas unterhalb den Korrelationen und Messwerten.

Die aus den Simulationen vorhergesagten mittleren Flammenlängen zeigen für die jeweils als spiegelsymmetrisch angenommenen Flammen mit  $\bar{H}/d(d = 10 \text{ m}) = 1.5$  und  $\bar{H}/d(d = 20 \text{ m}) = 1.3$  für die Kerosin-Poolflammen und  $\bar{H}/d(d = 6 \text{ m}) = 2.75$  für die Heptan-Poolflamme eine gute Übereinstimmung mit der empirischen Korrelation nach Heskestad.

Ein weiteres wichtiges Ergebnis ist, dass die Rußbildung in großen Poolflammen mit dem Magnussen-Modell nicht gut wiedergegeben werden kann, da auch in großen Abständen bis zu  $\Delta y = 3d$  von der Flamme hohe Rußvolumenanteile vorkommen. Die Implementierung des Lindstedt-Rußmodelles führt in der Heptan-Poolflamme hingegen zu sehr plausiblen Rußverteilungen mit hohen Rußvolumenanteilen vorwiegend im Bereich der Flammenzonen. Das Lindstedt-Rußmodell ermöglicht außerdem eine genauere Berechnung des Absorptionskoeffizienten in der Flamme, der stark vom Rußvolumenanteil abhängt. In den Kerosin-Poolflammen wurde der Absorptionskoeffizient über die Temperatur abgeschätzt. Diese Ab-

schätzung ergibt für den Absorptionskoeffizienten transiente Felder, die ähnlich verlaufen wie bei der Berechnung über den Rußvolumenanteil. Mit einer Sprungfunktion, die die drei kohärenten Strukturen hot spot, Rußballen und Reaktionszone berücksichtigt sowie die Luft als diatherm betrachtet, werden in der Abschätzung jedoch nur vier Abstufungen erhalten. Die Implementierung des Lindstedt-Modelles in die CFD-Simulation stellt somit einen wesentlichen Fortschritt dar, da es eine stufenlose und somit deutlich genauere Berechnung des Absorptionskoeffizienten ermöglicht.

Die vorhergesagte spezifische Ausstrahlung der Flammen  $\overline{SEP}(t)$  ist aufgrund der Pulsation stark vom betrachteten Zeitpunkt abhängig. Die zeitlich gemittelten Werte der vorhergesagten spezifischen Ausstrahlungen sind in den Kerosinflammen mit  $\overline{SEP}(d = 10 \text{ m}) = 48.8 \text{ kW/m}^2$ ,  $\overline{SEP}(d = 16 \text{ m}) = 40.2 \text{ kW/m}^2$  und  $\overline{SEP}(d = 20 \text{ m}) = 36.0 \text{ kW/m}^2$  deutlich vom Pooldurchmesser abhängig und stehen mit dem semi-empirischen Strahlungsmodell OSRAMO II in guter Übereinstimmung. Für die vorhergesagte  $\overline{SEP}(d = 6 \text{ m}) = 56.3 \text{ kW/m}^2$  der Heptan-Poolflamme liegen zurzeit keine Messwerte vor.

Aus den berechneten zeitabhängigen spezifischen Ausstrahlungen der Flammen ergeben sich transiente Bestrahlungsstärken  $E(\Delta y/d, t)$ , die außerdem vom relativen Abstand  $\Delta y/d$  abhängen. Die zeitlich gemittelte Bestrahlungstärke beträgt z.B. für die Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20 \text{ m}$   $\overline{E}(\Delta y/d = 1) \approx 5 \text{ kW/m}^2$ , wobei infolge der Pulsation der Flamme Maxima bis  $E_{\max}(\Delta y/d = 1) \approx 12 \text{ kW/m}^2$  für die Zeitdauer von  $t \approx 4 \text{ s}$  auftreten. Diese Einwirkungsdauer ist ausreichend, um Verletzungen ungeschützter Personen hervorzurufen, da die kritische Einwirkungsdauer  $\tau_{\text{cr}} \geq 3 \text{ s}$  beträgt.

Die vorliegenden CFD-Simulationen großer Poolflammen ermöglichen auch eine Vorhersage von angemessenen Abständen bzw. Abstandsbereichen zu Schutzobjekten und Personen und sind nützlich zur Durchführung technischer Schutzmaßnahmen in verfahrenstechnischen Anlagen.



# Symbolverzeichnis

## Lateinische Symbole

A	[-]	Konstante im Eddy-Dissipations-Modell
A	[-]	präexponentieller Faktor der Arrhenius-Gleichung
A <sub>p</sub>	[m <sup>2</sup> ]	Pooloberfläche
a	[-]	Flächenanteil
B	[-]	Konstante im Eddy-Dissipations-Modell
b <sub>F</sub>	[m/s <sup>2</sup> ]	Auftriebsbeschleunigung der Flamengase
C <sub>2</sub>	[m K]	zweite Planksche Konstante
c <sub>p</sub>	[kJ/(kg K)]	spezifische Wärmekapazität
d, D	[m]	Pooldurchmesser
D <sub>φ</sub>	[-]	allgemeiner Diffusions- bzw. Austauschkoefizient
E <sub>A</sub>	[J/mol]	Aktivierungsenergie
e	[-]	Extinktionskoefizient
F	[N]	Kraft
g	[m/s <sup>2</sup> ]	Erdbeschleunigung
g <sub>eff</sub>	[m/s <sup>2</sup> ]	Effektive Beschleunigung
h	[kJ/kg]	spezifische Enthalpie
H	[m]	Höhe
k	[1/m]	Absorptionskoefizient
k	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	turbulente kinetische Energie
k <sub>e</sub>	[1/m]	Wellenzahl des turbulenten Energiespektrums
k <sub>d</sub>	[Pa s]	Dilatationsviskosität, Volumenviskosität
k <sub>r</sub>	[-]	chemische Reaktionsgeschwindigkeitskonstante
L	[m]	Länge
L	[W/(sr m <sup>2</sup> )]	Strahldichte
ℓ	[m]	durchstrahlte Weglänge
M	[kg/mol]	Molare Masse
m	[-]	Komplexer Brechungsindex
m <sub>f</sub> <sup>''</sup>	[kg/(m <sup>2</sup> s)]	Massenabbrandrate
N	[1/m <sup>3</sup> ]	Partikeldichte im Lindstedt-Rußmodell
N <sub>A</sub>	[1/mol]	Avogadro-Konstante, N <sub>A</sub> = 6.022·10 <sup>23</sup> mol <sup>-1</sup>
N <sub>r</sub>	[-]	Anzahl der Reaktionen
N <sub>s</sub>	[-]	Anzahl der Spezies
n	[-]	Brechungsindex
n <sub>0</sub>	[1/(m <sup>3</sup> s)]	spontane Radikalbildung im Magnussen-Rußmodell
p	[Pa]	Druck

$\dot{Q}$	[W]	Wärmestrom
$\dot{Q}_R$	[W]	Wärmerückstrom von der Flamme zur Brennstoffoberfläche
$\dot{q}$	[W/m <sup>2</sup> ]	Wärmestrom pro Fläche
$R$	[kJ/(kmol K)]	allgemeine Gaskonstante, $R = 8.3145 \text{ kJ}/(\text{kmol K})$
$R_r$		Reaktionsgeschwindigkeit der Reaktion $r$
$\vec{r}$	[-]	Ortsvektor
$r_{mr}$	[-]	stöchiometrisches Massenverhältnis (mass ratio)
SEP	[W/m <sup>2</sup> ]	spezifische Ausstrahlung (surface emissive power)
$s$	[-]	Richtung
$T$	[K]	Temperatur
$T_A$	[K]	Aktivierungstemperatur
$U_P$	[m]	Poolumfang
$u$	[m/s]	Geschwindigkeit
$V$	[m <sup>3</sup> ]	Volumen
$v_a$	[m/s]	Abbrandgeschwindigkeit
$X$	[mol/kg]	spezifische Konzentration
$x_i, y_i$	[-]	Stoffmengenanteil der Komponente $i$
$x, y, z$	[m]	kartesische Koordinaten; $x$ : in Strömungsrichtung
$Y$	[kg/kg]	Massenanteil

## Griechische Symbole

$\alpha$	[W/(m <sup>2</sup> K)]	konvektiver Wärmeübergangskoeffizient
$\beta$	[1/s]	thermischer Ausdehnungskoeffizient im Boussinesq-Modell
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Dichte
$\delta$	[-]	Einheitstensor, Kronecker-Delta
$\lambda$	[W/(m K)]	Wärmeleitfähigkeitskoeffizient
$\varepsilon$	[m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie
$\mu$	[Pa s]	dynamische Viskosität
$\nu$	[m <sup>2</sup> /s]	kinematische Viskosität
$\phi$	[-]	allgemeine Zustandsgröße
$\phi_{Rad}$	[W]	Strahlungsfluss, Strahlungsleistung, Wärmestrom
$\sigma$	[W/(m <sup>2</sup> K <sup>4</sup> )]	Stefan-Boltzmann-Konstante
$\tau$	[N/m <sup>2</sup> ]	Schubspannung
$\tau$	[-]	Transmissionsgrad
$\tau_{exp}$	[s]	Expansionszeit in der die Luftzufuhr behindert wird
$\tau_t$	[Pa]	Reynolds-Spannungs-Tensor
$\Omega$	[sr]	Raumwinkel
$\omega$	[m <sup>2</sup> /s]	Wirbelstärke

**Indices**

a	ambient
b	Schwarzer Körper (black body)
c	Verbrennung (combustion)
cl	helle Verbrennungszone (clear zone)
e	Gleichgewicht (equilibrium)
F	Flamme
f	Bildung (formation)
f	Brennstoff (fuel)
ges	Gesamt
hs	Hot spot
i	Spezies
l	flüssig (liquid)
max	Maximum
min	Minimum
Nu	Keime/Radikale im Magnussen-Rußmodell (nuclei)
P	Pool
P	Flammenfahne (plume zone)
Pul	Pulsation
rü	Rückstrom
rad	Strahlung (radiation)
RB	Rußballen
re	Reaktionszone
ref	Referenzwert
rim	Poolwand (rim)
S	Ruß (soot)
Sd	Siedepunkt
st	stöchiometrisch
t	turbulent
u	Umgebung
v	Verdampfung (vaporisation)
vap	Brennstoffdampf (fuel vapour)
W	Wind
x, y, z	x-, y-, bzw. z-Richtung
Z	Zündung

**Sonstige Zeichen**

–	zeitlich gemittelte Größe
~	Favre-gemittelte Größe

### **Dimensionslose Kennzahlen**

Da	$t_t/t_{\text{chem}}$	turbulente Damköhler-Zahl
Fr	$u^2/(g l)$	Froude-Zahl
Le	$\lambda/(\rho c_p D)$	Lewis-Zahl
Re	$uL/\nu$	Reynolds-Zahl
Sc <sub>t</sub>	$\nu_t/D_t$	Turbulente Schmidt-Zahl



# 1 Einleitung

In der chemischen und petrochemischen Industrie ist die Lagerung, Verarbeitung und der Transport brennbarer Stoffe vonnöten. Dabei wird eine weltweite Zunahme der dort auftretenden Mengen verzeichnet. Durch ungewollte Freisetzung dieser Stoffe und nachfolgender Zündung kommt es, wie die Entwicklung zeigt, zu Personen- und Sachschäden [1-5]. Dabei lassen sich unterschiedliche Schadensereignisse wie z.B. Strahlflammen, Flammenbälle und vor allem Lachen- bzw. Poolfeuer klassifizieren [6]. Besonders letzteren kommt eine besondere Bedeutung zu, da über 75% der Schadensereignisse in der petrochemischen Industrie durch Lachen aus Verschüttungen bzw. Leckagen entstehen [4]. Es besteht daher neben dem wissenschaftlichen vor allem ein sicherheitstechnisches Interesse an der realistischen Beschreibung von Poolfeuern und deren Auswirkungen auf Personen und Gebäuden in unmittelbarer und mittelbarer Umgebung.

Es werden bis heute zahlreiche experimentelle Untersuchungen durchgeführt, die zu einem besseren Verständnis der komplexen Zusammenhänge von Verbrennungsreaktionen, Strömungsmechanik, Rußbildung und Wärmestrahlung führen. Basierend auf diesen Erfahrungen, aber auch auf theoretischen Überlegungen, werden Modelle entwickelt, die eine Abschätzung des Gefahrenpotentials ermöglichen sollen [6,7].

Da Experimente an großen Poolflammen in der Regel mit einem erheblichen Aufwand an Material, Zeit und nicht zuletzt mit umfangreichen Sicherheitsvorkehrungen verbunden sind, erfolgt in der jüngeren Vergangenheit vermehrt auch eine Beschreibung der Poolflammen durch die Bilanzgleichungen der Strömungsmechanik, zu deren Lösung rechnergestützte Methoden herangezogen werden. Solche Simulationen am Computer können detaillierte Erkenntnisse über Größen liefern, die experimentell nicht oder nur schwer zu messen sind. Weiterhin können bei einer einmal entwickelten Lösungsstrategie verschiedene Szenarien, sei es z.B. durch Variation der Randbedingungen oder Festlegung verschiedener Geometrien, berechnet und miteinander verglichen werden.

Die stetige Weiterentwicklung der Computertechnik ermöglicht heute die Anwendung numerischer Lösungsmethoden auf immer komplexere Problemstellungen, so dass diese Berechnungen auch für praktische Probleme zunehmend an Bedeutung gewinnen. Da die direkte numerische Berechnung großer Poolflammen jedoch auf absehbare Zeit praktisch zu lange Rechenzeiten erfordert (→ Kap. 4), ist die Einführung verschiedener Modelle notwendig. Die darin enthaltenen Vereinfachungen sollen eine möglichst gute Beschreibung bestimmter physikalischer oder chemischer Prozesse bei verringertem Rechenaufwand ermöglichen. Zur Vereinfachung der chemischen Komplexität kann beispielsweise eine Begrenzung auf einen Teil der zahlreichen Reaktionen [8,9], die Annahme einer Globalkinetik [10,11] oder bei bestimmten Aufgabestellungen sogar ein Verzicht auf die chemische Modellierung [12,13] erfolgen. Eine vereinfachte Beschreibung der chemischen Zusammenhänge führt notwendigerweise zur Modellierung des Rußes, der ein wichtiger Bestandteil großer Flammen darstellt. Die Berechnung von Entstehung, Transport und Dissipation von Wirbeln, die für den Impuls-

und Energietransport durch Konvektion maßgeblich sind, erfolgt mit Turbulenzmodellen [14] wie den Wirbelviskositäts- und Reynolds-Spannungsmodellen oder auch Large-Eddy-Simulationen. Eine weitere Zeitersparnis kann durch die Vernachlässigung der Kopplung einzelner Phänomene, wie z.B. der Einfluss chemischer Reaktionen auf die Wirbelbildung, erreicht werden, die aber zu Lasten der Genauigkeit der Ergebnisse gehen kann. Nicht zuletzt führt die Annahme rotationssymmetrischer Verhältnisse zur Reduzierung der Geometrie auf zwei Dimensionen und ermöglicht somit die Einsparung eines Großteils des Rechengitters [15,16].

In der Regel sind steigende Genauigkeiten der Modelle gleichbedeutend mit zunehmendem Rechenaufwand und numerischer Instabilität der Modelle. Zu starke Vereinfachungen bzw. Nichtbeachtung gekoppelter Phänomene können andererseits zu unrealistischen Ergebnissen führen. Daher besteht die Zielsetzung dieser Arbeit in der Entwicklung einer geeigneten Lösungsstrategie zur Modellierung großer Poolflammen, so dass die typischen Eigenschaften solcher Flammen in einer annehmbaren Zeit berechnet werden können. Im Gegensatz zu den empirischen Modellen, mit denen in der Regel nur zeitlich gemittelte Werte berechnet werden können, soll hier besonders die Dynamik der Flammen näher betrachtet werden. Nachfolgend sind die genauen Aufgabestellungen aufgelistet.

- Im Rahmen einer Literaturübersicht sollen die folgenden Problemstellungen beschrieben werden:
  - Die Bedeutung von Poolflammen als Schadenfeuer soll dargestellt werden.
  - Die Struktur und Dynamik großer Poolflammen mit Pooldurchmessern  $d \geq 1$  m soll vorgestellt werden. Das bisherige Verständnis von der periodischen Entstehung und dem Transport von Wirbelstrukturen innerhalb der Flammen soll beschrieben werden.
  - Empirische und halbempirische Strahlungsmodelle sollen dargelegt werden.
- Es soll eine Beschreibung von Poolflammen mit den Methoden der computergestützten numerischen Strömungsmechanik (CFD) erfolgen:
  - Die Berechnung von Poolflammen soll vorgestellt werden, wobei die Beschreibung unterschiedlicher chemischer und physikalischer Vorgänge in Form von Submodellen zu berücksichtigen ist. Es soll ferner eine möglichst weitgehende Kopplung der einzelnen Modelle realisiert werden.
  - Die dynamische Wirbelbildung und die zugrunde liegenden Zusammenhänge zwischen Strömungs-, Temperatur- und insbesondere den Speziesfeldern, soll untersucht werden.
  - Der Einfluss der dynamischen Strukturen auf die spezifische Wärmestrahlung (SEP) der Flamme soll untersucht werden.
  - Das durch die Wärmestrahlung bedingte Gefährdungspotential großer Poolflammen für benachbarte Personen und Objekte soll untersucht werden.

## 2 Experimentelle und theoretische Grundlagen von Poolflammen

### 2.1 Poolflammen als Schadenfeuer

In der chemischen und petrochemischen Industrie wird weltweit eine Zunahme der zu verarbeitenden, lagernden und transportierenden Mengen brennbarer Stoffe verzeichnet. Wie die Statistik zeigt, hat dies einen entsprechenden Anstieg der registrierten Brandereignisse zur Folge [1-5]. Je nach Szenario können dabei unterschiedliche Typen offener Feuer entstehen [6]. Der Typ hängt von der Freisetzungsart und den weiteren Randbedingungen wie z.B. dem Zündzeitpunkt ab:

- Pool-, Lachen- und Tankfeuer

Liegt der Brennstoff nach dem Entweichen in Form einer Flüssigkeitsschicht auf festem Untergrund oder auch auf Wasser vor, so können Lachen- oder Poolfeuer (→ Abb. 2.1a) entstehen. Wird die Ausbreitung des Brennstoffes durch eine Berandung wie z.B. bei einer Auffangtasse begrenzt, wird das Feuer als Poolfeuer klassifiziert. Im Gegensatz dazu liegt bei einem Lachenfeuer keine Berandung vor, die die Ausbreitung der brennbaren Flüssigkeit begrenzt. In Tankfeuern erfolgt die Zündung des brennbaren Stoffes bereits in



(a)



(b)



(c)

**Abb. 2.1.** Typen offener Feuer: (a) Kerosin-Poolflamme ( $d = 25$  m) [17]; (b) Strahlflamme; (c) Feuerball [3].

einem Behälter wie z.B. einem Tank oder auch einem chemischen Reaktor. Pool-, Lachen- und Tankfeuer stellen sich selbst erhaltene ( $\rightarrow$  Kap. 2.2), nicht-vorgemischte Flammen dar.

#### ■ Boilover

Hat sich der Brennstoff über eine Wasserschicht ergossen, oder hat sich z.B. in einem Tank durch Kondensationseffekte Wasser am Grund abgesetzt, kann es zusätzlich zu sogenannten Boilovers kommen. Der Brennstoff besitzt meist eine deutlich höhere Siedetemperatur als Wasser und kann sich daher entsprechend höher aufheizen. Erreicht diese Wärmezone die Wasserschicht wird dieses schlagartig verdampft. Der aufsteigende Wasserdampf drückt dann durch das enorme Ausdehnungsverhältnis von etwa 1600:1 Teile der heißen Brennstoffflüssigkeit aus dem Pool- bzw. Tankinnern heraus. Boilover stellen eine erhebliche Gefährdung für umstehende Personen dar und können weitere Brandherde hervorbringen.

#### ■ Strahl- und Fackelflamme

Bei einem hohen Anfangsimpuls wie z.B. bei relativ hohen Massenströmen durch kleine Austrittsquerschnitte und einer spontanen Zündung ist eine Strahlflamme ( $\rightarrow$  Abb. 2.1b) zu erwarten. Erfolgt die Freisetzung in einem solchen Fall über einen Kamin spricht man auch von einem Fackelfeuer.

#### ■ Feuerball und BLEVE

Bei einer verzögerten Zündung kann sich zunächst durch Akkumulation eine Wolke aus brennbaren Gas/Luft- bzw. Dampf/Luft-Gemischen bilden. Durch Zündung kann ein instationärer, turbulenter Feuerball ( $\rightarrow$  Abb. 2.1c) auftreten, der oftmals mit einer ausgeprägten Druckwelle verbunden ist. Feuerbälle sind bereits mehrfach beim Transport von Flüssiggasen wie z.B. LPG aufgetreten und führten infolge Dominoeffekts zu sogenannte BLEVEs (Boiling Liquid Expanding Vapour Explosion). Dabei werden zunächst die unter hohem Druck verflüssigten Gase durch die auftreffende Wärmestrahlung eines ersten Feuerballs oder auch eines Lachenfeuers (s.o.) über ihren Siedepunkt erhitzt. Die Behälterwände brechen dann unter dem Druck des gebildeten Gases explosionsartig auseinander und es tritt ein neuer Feuerball auf, der wiederum weitere Feuerbälle oder andere Schadenereignisse verursachen kann.

**Tab. 2.1.** Anzahl der Feuerbälle [3] und Tankfeuer [5] seit dem Jahr 1930.

Dekade	1930er	1940er	1950er	1960er	1970er	1980er	1990er	2000er
Feuerbälle	1	3	13	23	42	23	7*	
Tankfeuer			13	28	80	135	161	62**

\* bis Juli 1991

\*\* bis 28.09.2003



**Abb. 2.2.** Bilder des Großbrandes Treibstofflager Buncefield Depot bei London [18]: (a) Luftaufnahme des brennenden Tanklagers; (b) Die Satellitenaufnahme zeigt die Rußausbreitung über einen großen Teil Südenglands.

Pool-, Lachen- und Tankflammen kommen besondere Bedeutungen zu, da über 75% der Schadensereignisse in der petrochemischen Industrie durch Verschüttungen bzw. Leckagen entstehen [4]. Tab. 2.1 gibt einen Überblick über die registrierten Tankfeuer und Feuerbälle seit dem Jahr 1930. Während die Anzahl der Feuerbälle ihr Maximum in den 70er-Jahren überschritten zu haben scheint, ist eine deutliche Zunahme der Anzahl der Tankfeuer zu erkennen. Nach Persson und Lönnermark [5] werden weltweit jährlich allein ca. 15-20 Tankfeuer unterschiedlicher Ausmaße registriert. Sie vermuten jedoch, dass die tatsächliche Anzahl wesentlich höher ausfällt, da einige Vorfälle aufgrund eingeschränkter Publikation möglicherweise nur lokal und nicht international registriert werden.

Die Auswirkungen eines Brandereignisses auf Personen, angrenzende Gebäude oder die Umwelt können sehr beträchtlich sein. Für lebende Organismen stellt die Entstehung von toxischen und karzinogenen Verbrennungsprodukten eine unmittelbare aber auch langfristige Bedrohung dar. Während z.B. das im Laufe der Verbrennung gebildete Kohlenmonoxid sehr schnell zum Tod führen kann, entstehen durch Crack- bzw. Pyrolyseprozesse eine Vielzahl an



**Abb. 2.3.** Tankfeuer in der Thai Oil Raffinerie bei Bangkok [21]: (a) brennender Tank; (b) das Feuer ist auf weitere Tanks übergegangen, ein Tank im Vordergrund ist bereits kollabiert.

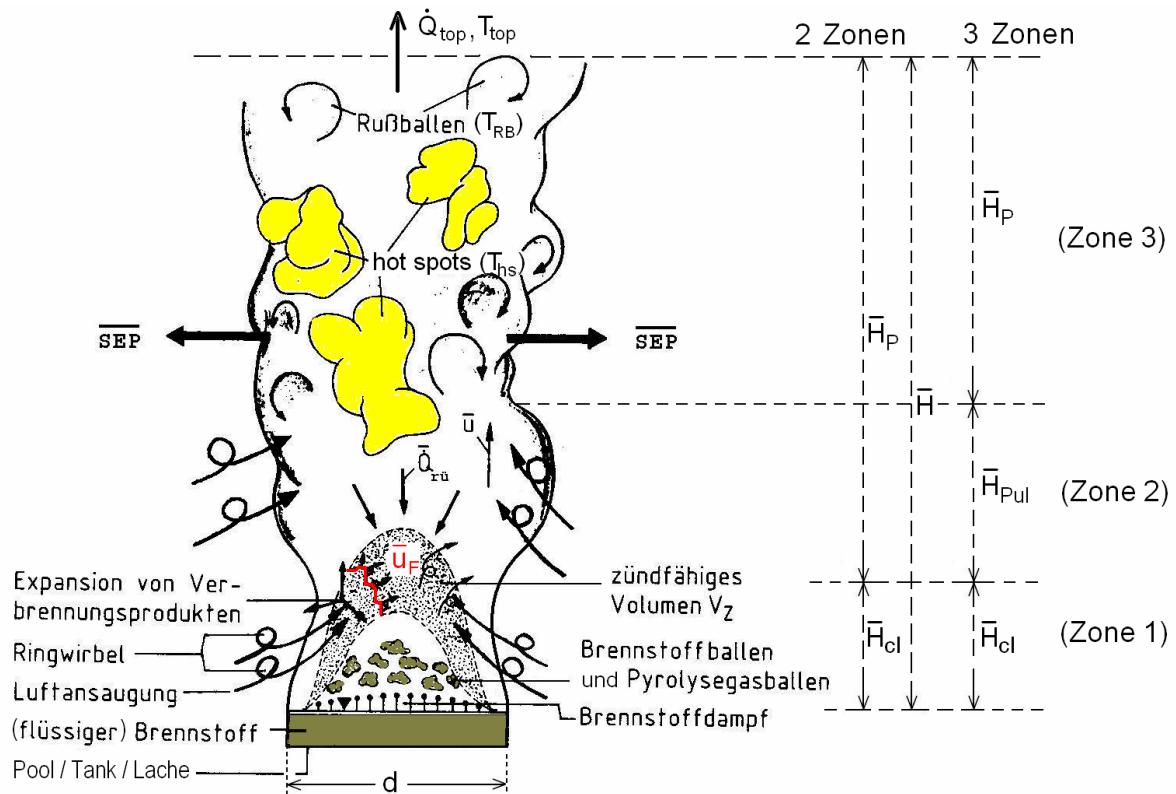
Produkten, die eine karzinogene Wirkung ausüben können. Ob der bei den meisten Feuern erzeugte Ruß in Form reinen Kohlenstoffs ebenfalls karzinogen wäre, ist noch nicht erwiesen. Tatsache ist jedoch, dass die meisten karzinogenen organischen Verbindungen adsorptiv an den Ruß gebunden sind und durch dessen Eigenschaft als Aerosol eine weite Verbreitung erfahren. Abb. 2.2 verdeutlicht, dass die Verbreitung der bei einem großen Schadenfeuer entstehenden Schadstoffe in der Regel nicht auf die unmittelbare Umgebung begrenzt ist. Beim wahrscheinlich größten Industriebrand Europas nach dem zweiten Weltkrieg ereignete sich am 11.12.2005 im Treibstofflager Buncefield Depot in Hemel Hempstead, zirka 40 Kilometer nördlich von London, zunächst eine schwere Explosion. Im weiteren Verlauf traten weitere Explosionen auf und alle 20 Tanks des Lagers fingen Feuer. Die dabei entstandene Rauchfahne erstreckte sich teilweise über 120 km und zog von ihrem Brandherd über den Ärmelkanal nach Frankreich und sogar nach Spanien [19]. Ältere Menschen und Asthmakranke wurden besonders von ihr beeinträchtigt. Wären damals Niederschläge eingetreten, hätten sie zwar das Ausmaß der Rauchwolke vermindert, der Regen hätte jedoch die entstandenen Schadstoffe verstärkt in den Erdboden in der näheren Umgebung gewaschen. Durch die enorme Wärmefreisetzung konnten die Löscharbeiten im Buncefield Depot erst nach 24 Stunden einsetzen [20]. Die freigesetzte Verbrennungsenthalpie großer Flammen wirkt in Form thermischer Strahlung auf Personen und angrenzende Objekte ein und kann zu tödlichen Verletzungen bzw. zur Schädigung bis hin zur Zerstörung von Anlageteilen bzw. Gebäuden führen. In Abb. 2.3 ist ein Tankfeuer in der Thai Oil Raffinerie bei Bangkok dargestellt. Im Gegensatz zum Tankfeuer in Hemel Hempstead erfolgte die Ausweitung auf vier weitere Tanks des Lagers ohne Explosionen nur aufgrund der hohen Wärmestrahlung. Ursache des Feuers am 03.12.1999 war ein fälschlicherweise geöffnetes Ventil [21]. Dadurch lief der Tank beim Befüllen über, das austretende Öl wurde durch einen startenden Automotor entzündet. Das Feuer verursachte 7 tödliche und 13 weitere schwerwiegende Verletzungen. Tausende Menschen wurden zunächst evakuiert. Der unmittelbare Sachschaden belief sich auf 22.3 Millionen US-Dollar, die Anlage musste zeitweilig abgeschaltet werden.

Um einen Beitrag zur sicheren Abschätzung der Wärmestrahlung solcher Flammen zu leisten befasst sich die vorliegende Arbeit mit den Eigenschaften und der numerischen Berechnung von Poolflammen, die einen Typus solcher offenen Schadenfeuer darstellen.

## 2.2 Physikalisch-chemische Vorgänge

Bei Poolflammen handelt es sich um nicht-vorgemischte, frei brennende und, wegen des sehr geringen Anfangsimpulses der Brennstoffgase, auftriebsbestimmte Flammen. Im hier betrachteten Durchmesserbereich von  $d > 1$  m sind sie außerdem stark turbulent. Je nach Betrachtungsweise werden Poolflammen meist in zwei oder drei nicht-kontinuierliche Zonen unterteilt, deren Höhen bzw. Längen bisher nicht bzw. nur mit großen Unsicherheiten berechenbar sind ( $\rightarrow$  Abb. 2.4). Unmittelbar über dem Poolrand liegt in der Regel eine hell leuchtende Verbrennungszone (clear zone) vor. Der darüber liegende Bereich der Flammenfahne (plume zone) ist für viele Brennstoffe mit einer dunklen Rußschicht überzogen und unterscheidet sich dadurch optisch deutlich von der hellen Verbrennungszone. Allerdings durchbrechen vereinzelt die ebenfalls hell leuchtenden hot spots die äußere Rußschicht. Die kohärenten Flammenstrukturen wie hot spots und Rußballen werden in Kap. 2.7 näher erläutert. Neben der hellen





**Abb. 2.4.** Physikalisch-chemische Vorgänge in auftriebsbehafteten, nicht-vorgemischten Flammen und Einteilung der Flamme in verschiedene Zonen [2].

Verbrennungszone und der Flammenfahne kann zusätzlich eine pulsierende Zone zwischen den Beiden definiert werden. Die in den Flammen ablaufenden physikalisch-chemischen Vorgänge, die auch die Pulsation der Flamme bewirken, sind schematisch in Abb. 2.4 dargestellt. Prinzipiell finden folgende Vorgänge statt:

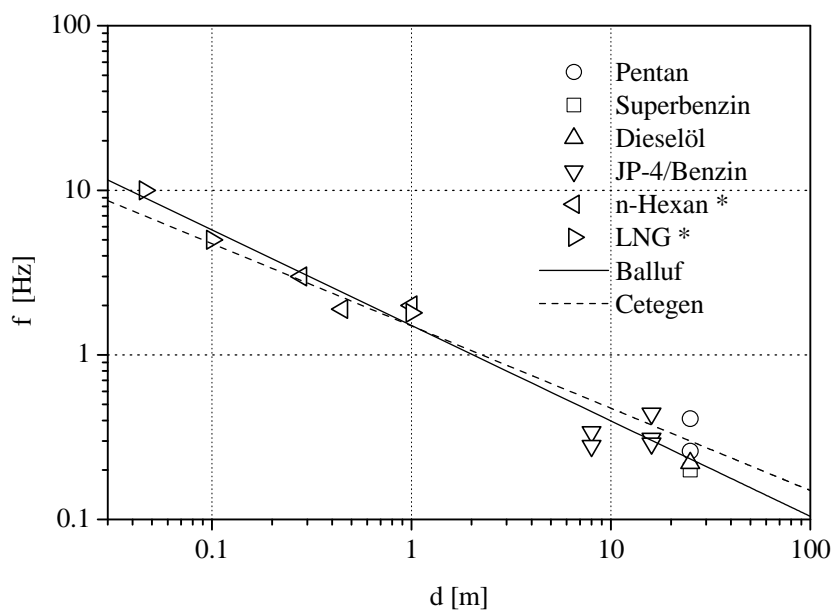
1. Der in der Regel flüssige Brennstoff verdampft durch Energiezufuhr in Form des Wärmerückstroms  $\bar{Q}_{r\ddot{u}}$  mit einer bestimmten Massenabbrandrate bzw. Abbrandgeschwindigkeit ( $\rightarrow$  Kap. 2.3.1). Die Brennstoffdämpfe besitzen eine geringe Anfangsgeschwindigkeit von  $\bar{u}_{vap} \approx 1$  cm/s. Es entstehen zunächst kleine Wirbelstrukturen, sogenannte Brennstoffballen. Durch Vermischung mit einströmender Umgebungsluft bilden sie dann ein zündfähiges Volumen  $V_Z$ , in Abb. 2.4 schraffiert dargestellt.
2. Das entstandene Brennstoff/Luft-Volumen  $V_Z$  wird ebenfalls durch den Wärmerückstrom  $\bar{Q}_{r\ddot{u}}$  entzündet. Es bildet sich eine Verbrennungswelle, die sich mit der Geschwindigkeit  $\bar{u}_F$  ausbreitet. Die Verbrennungsprodukte expandieren und behindern die Zufuhr unverbrauchten Luftsauerstoffs. Für eine kurze Zeit  $\tau_{exp}$  wird somit kein neues zündfähiges Gemisch gebildet.
3. Bedingt durch die Auftriebskräfte steigen die heißen Reaktionsprodukte auf, die Flammenkontur wird darunter eingeschnürt. Die aufsteigenden Gase verursachen eine intensive Luftansaugung und nach Ablauf der Zeit  $\tau_{exp}$  entsteht zusammen mit den Brennstoffballen erneut ein zündfähiges Volumen  $V_Z$ .

4. Das Volumen  $V_Z$  wird erneut gezündet und die entstehende Verbrennungswelle startet, wie in 2. beschrieben, einen neuen Verbrennungszyklus. Das periodische Ablaufen der einzelnen Schritte wird als Pulsation oder Oszillation der Flamme bezeichnet.

Die oben beschriebenen Vorgänge beschreiben das beobachtete Pulsieren von Flammen (pulsation, puffing) ohne Berücksichtigung der brennstoffabhängigen chemischen Reaktionen. Experimente zeigen, dass die Frequenz des Pulsierens tatsächlich kaum von der Art des Brennstoffs abhängt, sondern hauptsächlich vom Flammendurchmesser und vom Anfangsimpuls der Brennstoffdämpfe. Letzterer ist vor allem bei Brennerflammen, die ebenfalls pulsieren, von Bedeutung. Hamins [23] beobachtet beispielsweise in Methanflammen mit Pooldurchmessern von  $0.0074 \text{ m} \leq d \leq 0.10 \text{ m}$  eine Änderung der Frequenz um bis zu 20 % bei einer beträchtlichen Änderung des vorgegebenen Anfangsimpulses des Brennstoffs. Folgeversuche, in denen er 0-50 Vol.-% des Methans durch Stickstoff ersetzt, ergeben eine gleichbleibende Frequenz auch wenn dadurch die gesamte freigesetzte Verbrennungsenergie um einen Faktor 2 verändert wird. Weitere Versuche von Hamins oder auch von Cetegen [13] zeigen, dass auch nicht-reaktive Helium-Ausströmungen ähnlich oszillieren wie Poolflammen. Laut Hamins ist dafür jedoch eine deutlich höhere Anfangsgeschwindigkeit als bei den wärmefreisetzenden Flammen notwendig.

Wenn der Brennstoffeinfluss auf die Frequenz vernachlässigt werden kann, ist für Poolflammen mit festen oder flüssigen Brennstoffen, bei denen der Anfangsimpuls nicht vorgegeben wird, der Pooldurchmesser  $d$  der maßgebende Parameter. Dementsprechend hängen die Korrelationen von Hamins [23], Balluff [24] und Cetegen [25] jeweils nur von  $d$  ab:

$$\text{Hamins: } f \propto d^{-0.49} \quad (2.1)$$



**Abb. 2.5.** Korrelationen von Balluff [24] und Cetegen [25] für die pooldurchmesserabhängige Pulsationsfrequenzen  $f$ , sowie von Balluff bzw. Schönbucher [22] (markiert mit \*) gemessene Frequenzen für verschiedene Brennstoffe und Durchmesser.



$$\text{Balluff: } f(d) = 1.51d^{-0.58} \quad (2.2)$$

$$\text{Cetegen: } f(d) = 1.50d^{-0.50} \quad (2.3)$$

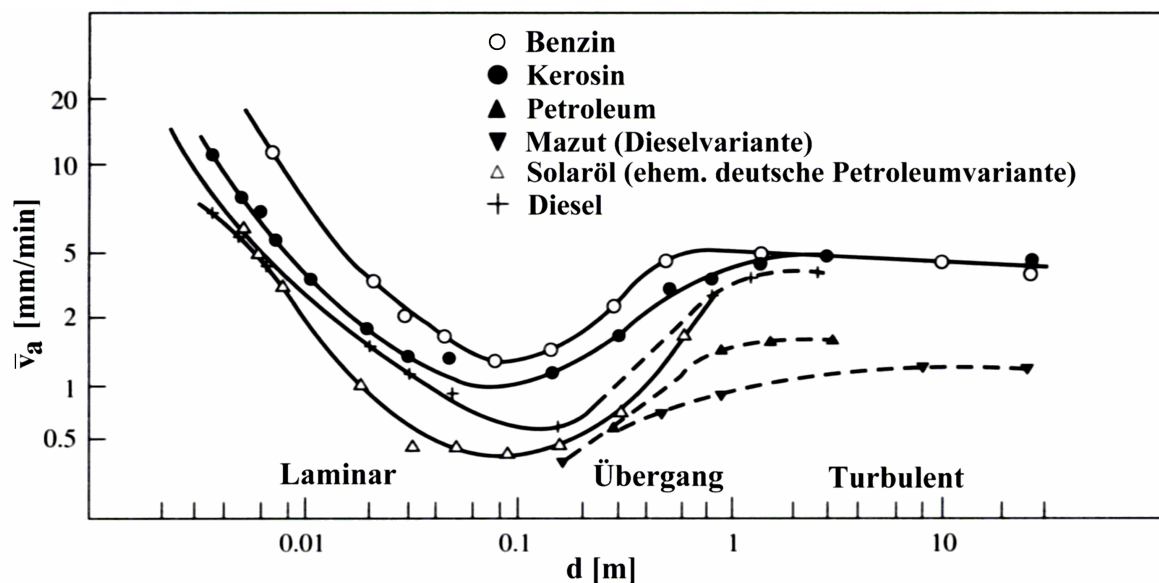
Mit den Gleichungen von Balluff und Cetegen können die Frequenzen pulsierender Flammen über einen großen Pooldurchmesserbereich und für viele unterschiedliche Brennstoffe, wie z.B. Feststoffe (Polymethylmethacrylat), Flüssigkeiten (Methanol, Aceton, Kerosin, Diesel, Benzin, Rohöl etc.) und Gase (LNG, Propan, etc.) abgeschätzt werden (→ Abb. 2.5).

## 2.3 Einflussgrößen und Geometrie

Die Beschreibung einer Flamme erfolgt meist über die Flammenlänge, den Flammendurchmesser, die Abbrandgeschwindigkeit bzw. die Massenabbrandrate sowie die Flammentemperaturen und ihre Strahlungseigenschaften. Dazu werden meist zeitliche Mittelwerte herangezogen. Es werden aber auch zunehmend zeitliche Verläufe publiziert, die Aussagen über die Dynamik verschiedener Flammen ermöglichen. Die aus verschiedenen Messungen hergeleiteten Abschätzungen für die Einflussgrößen und die Geometrie großer Flammen werden im Folgenden dargestellt.

### 2.3.1 Massenabbrandrate und Abbrandgeschwindigkeit

Eine der ersten systematischen Studien über das Abbrandverhalten von Poolfeuern in Abhängigkeit von Brennstoff und Pooldurchmesser stammt von Blinov und Khudiakov [26], deren Arbeiten später von Hottel [27] ins Englische übertragen wurden. Einige Ergebnisse dieser Arbeiten sind in Abb. 2.6 dargestellt. Es fällt auf, dass die mittlere Abbrandgeschwindigkeit

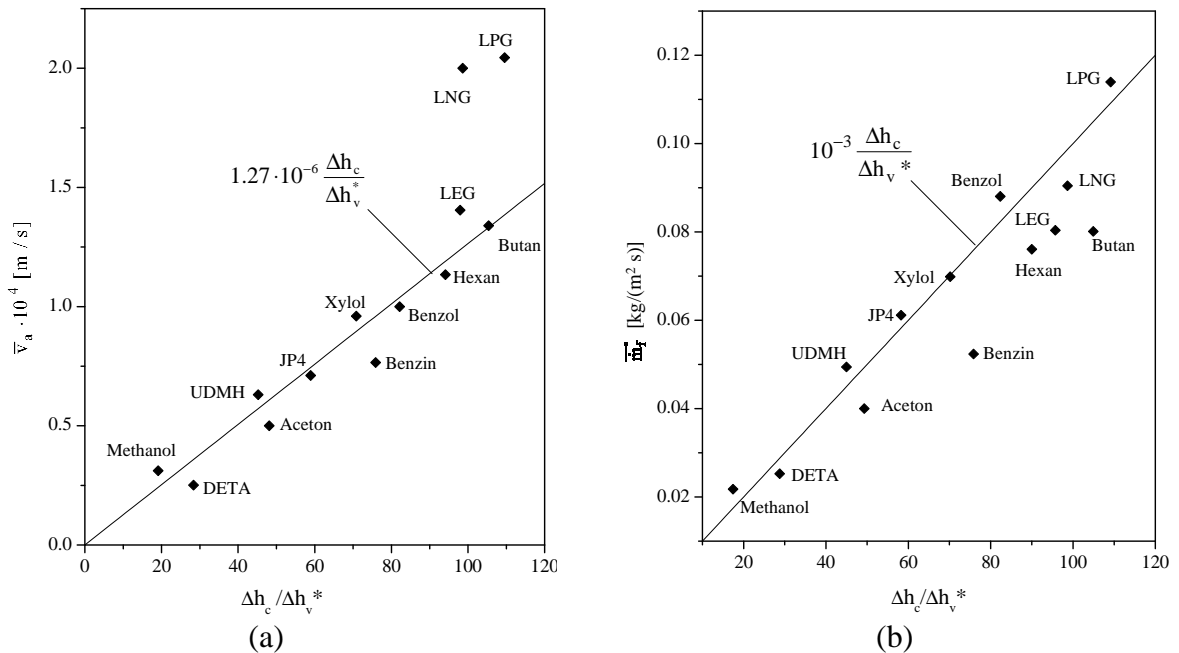


**Abb. 2.6.** Abbrandgeschwindigkeit  $v_a$  als Funktion von Pooldurchmesser  $d$  für verschiedene Brennstoffe nach Blinov und Khudiakov [26] sowie Hottel [27].

$\bar{v}_a$ , also die Geschwindigkeit, mit der die Brennstoffoberfläche bei einem vorgegebenen Flüssigkeitsvolumen absinkt, für alle Brennstoffe tendenziell die gleiche Abhängigkeit vom Pooldurchmesser  $d$  aufweist. Mit zunehmendem Pooldurchmesser nimmt die Abbrandgeschwindigkeit im laminaren Bereich bis  $d \approx 0.1$  m zunächst stark ab. Im Übergangsbereich zwischen laminarer und turbulenter Flamme bei  $0.1 \text{ m} \leq d \leq 1 \text{ m}$  nimmt  $\bar{v}_a$  dann wieder deutlich zu, erreicht allerdings nicht das Maximum des laminaren Bereiches. Im voll turbulenten Bereich bei  $d > 1 \text{ m}$  erreicht die Abbrandgeschwindigkeit dann einen nahezu konstanten Wert, der mit Ausnahmen für Petroleum und der Dieselvariante Mazut bei  $\bar{v}_a \approx 4 \text{ mm/min}$  liegt, und der nicht weiter vom wachsendem Durchmesser abhängt. Hottel begründet den Verlauf von  $\bar{v}_a$  mit dem Wärmerückstrom  $\bar{Q}_{\text{rfl}}$  von der Flamme zur Brennstoffoberfläche, der, dividiert durch die Verdampfungsenthalpie  $\Delta h_v$ , die Abbrandgeschwindigkeit ergibt. Nach Hottel gilt für  $\bar{Q}_{\text{rfl}}$ :

$$\bar{Q}_{\text{rfl}} = \frac{4\lambda}{d}(T_F - T_u) + \alpha(T_F - T_u) + \sigma(T_F^4 - T_u^4)(1 - e^{-kd}). \quad (2.4)$$

Der erste Term in Gl. (2.4) beschreibt den Wärmefluss durch Leitung über die Tankwand, der zweite Term den konvektiven Wärmerückstrom und der dritte den Strahlungstransport auf den flüssigen Brennstoff. Dementsprechend symbolisieren  $\lambda$  den Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten,  $\alpha$  den konvektiven Wärmeübertragungskoeffizienten,  $k$  den Absorptionskoeffizienten,  $T_F$  die Flammen- und  $T_u$  die Umgebungstemperatur. Der Wärmeeintrag über die Tankwand nimmt einen entscheidenden Stellenwert bei Tankdurchmessern bis zu wenigen Zentimetern ein. Mit zunehmendem Tank- bzw. Pooldurchmesser nimmt er dann aber linear ab, dementsprechend sinkt auch  $\bar{v}_a$ . Für  $d \gg 1 \text{ cm}$  ist der Wärmeeintrag über die Wand nicht mehr von Bedeutung. Der konvektive Term erreicht sein Minimum bei  $d \approx 10 \text{ cm}$ , nimmt dann zunächst zu und sorgt somit für das Ansteigen von  $\bar{v}_a$ . Für  $d > 1 \text{ m}$  wird die Flamme als großer, optisch dichter, schwarzer bzw. grauer Strahler angesehen. Hier wird der Wärmerück-



**Abb. 2.7.** (a) Abbrandgeschwindigkeit  $\bar{v}_a$  und (b) Massenabbrandrate  $\bar{m}_f$  als Funktion der thermochemischen Eigenschaften des Brennstoffs.

strom durch den Strahlungsbeitrag dominiert.

Für die Abhängigkeit der Abbrandgeschwindigkeit vom Pooldurchmesser gilt nach Hottel:

$$\bar{v}_a(d) = \bar{v}_{a,\max} (1 - e^{-kd}) . \quad (2.5)$$

Diese Gleichung gibt Blinovs und Khudiakovs Messergebnisse für Benzin, Diesel, Kerosin, Mazut und Petroleum gut wieder.

Basierend auf Brandversuchen mit flüssigen Brennstoffen wie z.B. Methanol, flüssig-H<sub>2</sub>, LNG, Butan, Hexan, Benzol und Xylol bei Pooldurchmessern  $d \approx 1$  m gibt Burgess [28] die maximale Abbrandgeschwindigkeit  $\bar{v}_{a,\max}$  wie folgt an:

$$\bar{v}_{a,\max} = 1.27 \cdot 10^{-6} \frac{\Delta h_c}{\Delta h_v} . \quad (2.6)$$

Hier symbolisieren  $\Delta h_c$  und  $\Delta h_v$  die Verbrennungs- bzw. Verdampfungsenthalpie.

Bei Brennstoffgemischen kann nicht von einer gleichmäßigen Abbrandgeschwindigkeit ausgegangen werden. Zu Beginn werden verstärkt die niedriger siedenden Komponenten  $i$  verbrannt, während im späteren Verlauf der zunehmende Massenanteil der höher siedenden Komponenten zunächst zum Siedepunkt erhitzt werden muss und dann das Brandverhalten der Flamme bestimmen wird. Dies belegen Grumer et al. [29] mit umfangreichen experimentellen Untersuchungen von Gemischen aus unsymmetrischem Dimethyl-Hydrazon (UDMH,  $\vartheta_{S,UDMH} \approx 63$  °C) und Diethyltriamin (DETA,  $\vartheta_{S,DETA} = 207$  °C) und leiten daraus eine Gleichung zur Abschätzung von  $\bar{v}_{a,\max}$  ab:

$$\bar{v}_{a,\max} = 1.27 \cdot 10^{-6} \frac{\sum_i \tilde{y}_i \Delta h_{c,i}}{\sum_i \tilde{y}_i \Delta h_{v,i} + \sum_i \tilde{x}_i \int_{T_0}^{T_{sd}} c_p(T) dT} . \quad (2.7)$$

Hier stellen  $\tilde{x}_i$  und  $\tilde{y}_i$  die Molenbrüche in der Flüssigkeits- bzw. Dampfphase dar,  $c_p$  die spezifische Wärmekapazität und  $T_0$  und  $T_{sd}$  die Anfangs- bzw. Siedetemperatur. Der Nenner, der die Abhängigkeit der Verdampfungsenthalpie von Temperatur und Molenbrüchen der Komponenten angibt, wird im Weiteren mit  $\Delta h_v^*$  angegeben. Da die Temperaturabhängigkeit nur einen geringen Einfluss von ca. 0.5 % pro Kelvin Änderung der Anfangstemperatur ausübt, kann Gl. (2.7) vereinfacht werden wenn im Gemisch weiterhin  $\Delta h_{c,i} \approx \Delta h_{v,i}$  und  $\tilde{y}_i > \tilde{x}_i$  gilt:

$$\bar{v}_{a,\max} = \sum_i \tilde{y}_i \bar{v}_{a,i} . \quad (2.8)$$

Sowohl Gl. (2.7) als auch Gl. (2.8) geben eine gute Abschätzung für  $\bar{v}_{a,\max}$  von Brennstoffgemischen, auch wenn die Komponenten weit auseinander liegende Siedepunkte aufweisen. Gl. (2.7) ist weiterhin eine gute Näherung für  $\bar{v}_{a,\max}$  aller flüssigen Kohlenwasserstoffe, lediglich für verflüssigte Gase wie z.B. LNG und LPG wird  $\bar{v}_{a,\max}$  fast um den Faktor 2 zu niedrig abgeschätzt ( $\rightarrow$  Abb. 2.7a).

Die mittlere Massenabbrandrate  $\bar{\dot{m}}_f$  in kg/(m<sup>2</sup> s) wird aus der Multiplikation der Abbrandgeschwindigkeit mit der Flüssigkeitsdichte ermittelt und ergibt sich zu [6]

$$\bar{m}_f'' = 10^{-3} \frac{\Delta h_c}{\Delta h_v^*}. \quad (2.9)$$

Wie in Abb. 2.7 ersichtlich, beschreibt Gl. (2.9) die experimentellen Ergebnisse weniger exakt als Gl. (2.7), allerdings deckt sie einen weiten Brennstoffbereich ab und gilt auch für Flüssiggase.

Die in Abb. 2.7 dargestellten Daten und Korrelationen gelten für Poolfeuer auf Land. Die Abbrandgeschwindigkeit auf Wasser kann insbesondere für Flüssiggase deutlich anders ausfallen, da deren Siedepunkte unter der Umgebungstemperatur liegen und somit dem Wärmeintrag durch das Wasser eine besondere Rolle zukommt. Experimente zeigen, dass dadurch  $\bar{v}_a$  z.B. von LNG und LPG auf Wasser um einen Faktor 3 bzw. 2 größer ist als auf Land.

## 2.3.2 Flammenform

### 2.3.2.1 Basisdurchmesser

Verschüttungen von flüssigen Kohlenwasserstoffen können generell in kontinuierliche Freisetzen eingeteilt werden, bei der die Flüssigkeit über einen längeren Zeitraum wie z.B. aus einer Rohrleitung ausläuft, und in momentane (schlagartige) Freisetzen, bei der die Flüssigkeit in einer sehr kurzen Zeit wie z.B. aus einem geborstenen Tankwagen ausläuft.

Im Fall einer kontinuierlichen Freisetzung wird sich die brennende Flüssigkeit so lange ausbreiten, bis sie entweder auf ein Hindernis stößt oder die Abbrandgeschwindigkeit  $\bar{v}_a$  den Wert der Verschüttungsrate  $\bar{V}_l$  [ $\text{m}^3/\text{s}$ ] bezogen auf die Brennstofffläche erreicht. Der stationäre oder Gleichgewichtsdurchmesser  $d_{B,e}$  kann dann entweder über die Poolfläche  $A_P$  und deren Umfang  $U_P$  berechnet werden [30]

$$d_{B,e} = 4 \frac{A_P}{U_P}, \quad (2.10)$$

oder, da die beiden Größen meist nur schwer abzuschätzen sind, unter Annahme eines angenähert kreisrunden Brennstoffpools nach [6]

$$d_{B,e} = 2 \cdot \sqrt{\frac{\bar{V}_l}{\pi \bar{v}_a}}. \quad (2.11)$$

Gl. (2.11) gilt, wenn der dominierende Wärmetransport zur Poolflüssigkeit durch die Flamme erfolgt und die Abbrandgeschwindigkeit konstant bleibt. Letzteres ist für die meisten flüssigen Kohlenwasserstoffe mit  $T_{Sd} > T_u$  gegeben. Weiterhin muss der Wärmeübergang vom Substrat auf die Poolflüssigkeit zeitlich konstant sein. Dies gilt für Flüssiggase auf Wasser, der zeitlich abnehmende Wärmeübergang bei flüssigen Brennstoffen auf Land wird in Gl. (2.11) aber nicht berücksichtigt. Eine Abnahme der Brennstoffmasse durch Perkolation durch den Boden oder eine Teillöslichkeit in Wasser wird ebenfalls nicht berücksichtigt. Allerdings sind die Geschwindigkeiten dieser Effekte für die meisten Kohlenwasserstoffe i.a. relativ klein im Vergleich zur Abbrandgeschwindigkeit.

Der stationäre Durchmesser  $d_{B,e}$  wird in der Zeit  $t_e$  erreicht [31],

$$t_e = 0.564 \frac{d_{B,e}}{\sqrt[3]{g_{\text{eff}} \bar{v}_a d_{B,e}}} \quad (2.12)$$

mit der effektiven Beschleunigung  $g_{\text{eff}} = g(1 - \rho_l / \rho_{\text{Wasser}})$  auf Wasser bzw.  $g_{\text{eff}} = g$  auf Land.

Im Fall einer momentanen Freisetzung nimmt ein Feuer in seinem Durchmesser  $d_B$  zu, bis eine Barriere erreicht oder der gesamte Brennstoff ausgelaufen ist. Raj [32] gibt zur Bestimmung der momentanen und maximalen Flammendurchmesser  $d_B(t)$  und  $d_{\text{max}}$  sowie der Zeit  $t_{\text{max}}$  zum Erreichen des maximalen Durchmessers folgende Gleichungen an:

$$\left( \frac{d_B(t)}{d_{\text{max}}} \right)^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} \left( \frac{t}{t_{\text{max}}} \right) \left[ 1 + \left( \frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \right) \left( \frac{t}{t_{\text{max}}} \right)^2 \right], \quad (2.13)$$

$$d_{\text{max}} = 2 \left( \frac{V_l^3 g_{\text{eff}}}{\bar{v}_a^2} \right)^{\frac{1}{8}}, \quad (2.14)$$

$$t_{\text{max}} = 0.6743 \left( \frac{V_l}{g_{\text{eff}} \bar{v}_a^2} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad (2.15)$$

mit dem insgesamt freigesetzten Volumen  $V_l$ . Der maximale Durchmesser existiert nur für relativ kurze Zeit, so dass Folgeberechnungen mit  $d_{\text{max}}$  sehr konservativ ausfallen werden. Ein zeitlich gemittelter Durchmesser kann über Integration bis zu  $t_{\text{max}}$  berechnet werden, so dass realistischere Werte für zeitliche Mittelwerte, z.B. für die Wärmestrahlung ( $\rightarrow$  Kap. 2.8), erhalten werden. Nicht mehr erfasst werden dann allerdings die Gefahren durch kurzzeitige Maxima.

### 2.3.2.2 Flammenlänge

Der Vergleich von Flammenlängen oder -höhen gestaltet sich problematisch, denn schon bei der Definition können verschiedene Kriterien herangezogen werden. So kann die Länge beispielsweise nach den Isolinien stöchiometrischer Zusammensetzung festgelegt werden [33] oder auch über die sichtbare Flammenlänge [34,35]. Die dimensionslose zeitlich gemittelte sichtbare Flammenlänge kann über folgende Korrelation berechnet werden:

$$\frac{\bar{H}}{d} = a \left( \frac{\bar{\dot{m}}_f''}{\rho_u \sqrt{gd}} \right)^b (\bar{u}_w^*)^c. \quad (2.16)$$

Hier ist  $\bar{\dot{m}}_f''$  die Massenabbrandrate des Brennstoffs,  $g$  die Erdbeschleunigung und  $\rho_u$  die Dichte der Umgebungsluft. Bei Windverhältnissen neigt sich die Flamme ( $\rightarrow$  Kap. 0), was zu einer veränderten Flammenlänge führt. Dies wird durch die dimensionslose Windgeschwindigkeit berücksichtigt:

$$\bar{u}_w^* = \bar{u}_w \left( \frac{g \bar{\dot{m}}_f'' d}{\rho_{\text{vap}}} \right). \quad (2.17)$$

**Tab. 2.2.** Parameter für die Abschätzung der dimensionslosen sichtbaren Flammenlänge nach (2.16).

Korrelation	a	b	c	Bemerkung	
Thomas 1	42	0.61	0	gemessen an Holzfeuergittern ohne Wind-einfluss; $\bar{H}/d$	[37]
Thomas 2	55	0.67	-0.21	gemessen an Holzfeuergittern mit Windeinfluss; $(H/d)_{\max}$	[37]
Moorhouse	6.2	0.254	-0.044	gemessen an großen zylindrischen LNG-Poolfeuern; $(H/d)_{\max}$ ; $\bar{u}_w^* = \bar{u}_w^*(10)$	[38]
Munoz 1	8.44	0.298	-0.126	gemessen an Benzin- und Diesel-Poolfeuern; $(H/d)_{\max}$	[36]
Munoz 2	7.74	0.375	-0.096	gemessen an Benzin- und Diesel-Poolfeuern; $\bar{H}/d$	[36]

Teilweise wird auch die dimensionslose Windgeschwindigkeit in einer Höhe von 10 m herangezogen:

$$\bar{u}_w^*(10) = \bar{u}_w(10 \text{ m}) \left( \frac{g \bar{m}_f'' d}{\rho_{\text{vap}}} \right). \quad (2.18)$$

Es wurden von verschiedenen Autoren verschiedene Parameter  $a$ ,  $b$ ,  $c$  für Gl. (2.16) publiziert, die in Tab. 2.2 aufgeführt sind. In der Regel werden die maximalen sichtbaren Flammenlängen  $(H/d)_{\max}$  etwas besser vorhergesagt als die zeitlich gemittelten Flammenlängen  $\bar{H}/d$ . Zur Berechnung von  $\bar{H}/d$  werden in der Literatur häufig die Thomas- [37] und die Moorhouse-Korrelationen [38] herangezogen.

Eine ebenfalls häufig zitierte Korrelation für die Flammenlänge stammt von Heskestad [39]. Seine Berechnung basiert auf Flammenlängen aus verschiedenen Literaturquellen sowohl für kleine als auch für große Pooldurchmesser. In seine Gleichung gehen neben dem Pooldurchmesser  $d$  die Massenabbrandrate  $\bar{m}_f''$  und die spezifische Verbrennungsenthalpie  $\Delta h_c$  als Stoffeigenschaften des Brennstoffs ein, sowie die spezifische Wärmekapazität  $c_{p,u}$ , Temperatur  $T_u$  und Dichte  $\rho_u$  der Umgebungsluft und weiterhin das stöchiometrische Massenverhältnis der Verbrennungsluft zum Brennstoffdampf  $r_{\text{mr}}$ :

$$\frac{H}{d} = -1.02 + 15.6 \left( \frac{c_{p,u} T_u \bar{m}_f''^2 r_{\text{mr}}^3}{g \rho_u^2 \Delta h_c d^5} \right)^{\frac{1}{5}}. \quad (2.19)$$

Zum Vergleich der Korrelationen von Thomas, Moorhouse und Heskestad sind die berechneten dimensionslosen Flammenlängen sowie Messwerte gegen die dimensionslose Massenabbrandrate in Abb. 2.8 aufgetragen. Die Änderungen der dimensionslosen Flammenlängen mit zunehmender dimensionsloser Abbrandrate sind nach Heskestad und Thomas recht ähnlich, allerdings sind die Werte aus der Heskestad-Korrelation überwiegend größer als die Werte nach Thomas. Die Werte nach Moorhouse unterscheiden sich vor allem für sehr kleine und sehr hohe dimensionslose Abbrandraten deutlich von den anderen beiden Korrelationen.

Bei kleinen dimensionslosen Abbrandraten ergeben sich etwas höhere dimensionslose Flammenlängen und bei hohen dimensionslosen Abbrandraten deutlich niedrigere Werte als nach den beiden anderen Korrelationen.

### 2.3.2.3 Flammenneigung

Bei Windeinfluss werden Flammen leewärts um den Winkel  $\theta$  von der Flammenachse abgelenkt ( $\rightarrow$  Abb. 2.9). Eine Abschätzung für den zeitlich gemittelten Winkel  $\bar{\theta}$  in einem Pool-durchmesserbereich von  $0.3 \text{ m} < d < 0.6 \text{ m}$  liefern Welker und Sliepcevic [41]

$$\frac{\tan \bar{\theta}}{\cos \bar{\theta}} = 3.3 \text{Re}^{0.07} \text{Fr}^{0.8} \left( \frac{\rho_{\text{vap}}}{\rho_u} \right)^{-0.6} \quad (2.20)$$

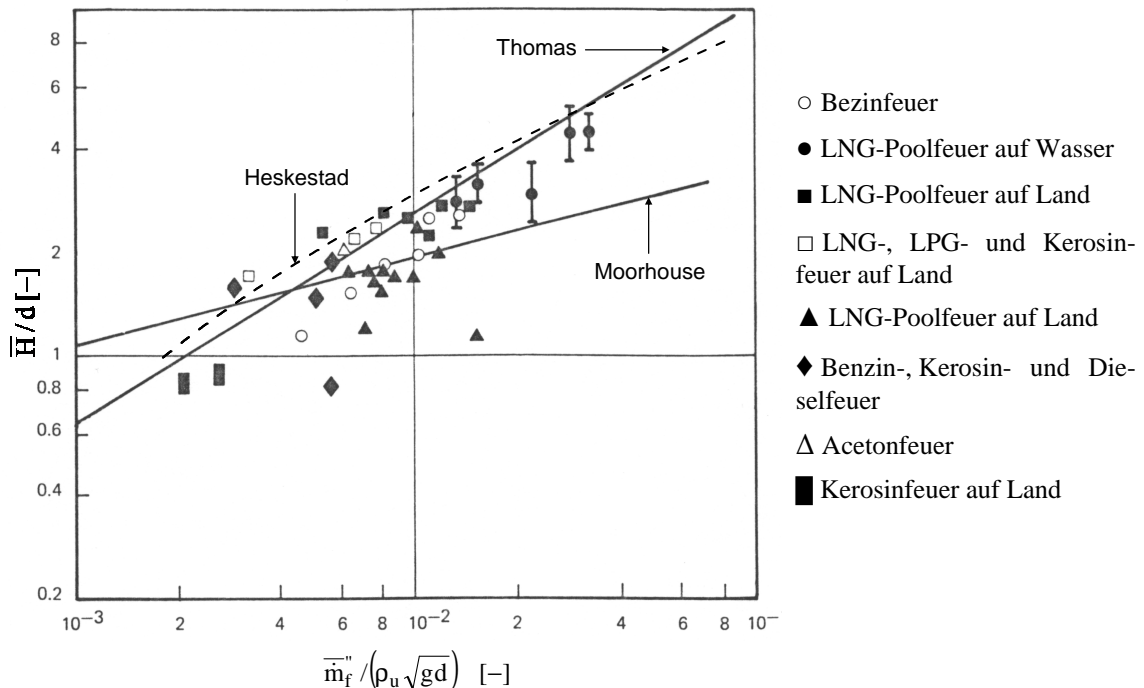
mit

$$\text{Re} = \frac{d \bar{u}_w}{\nu} \quad (\text{Reynolds-Zahl}) \quad (2.21)$$

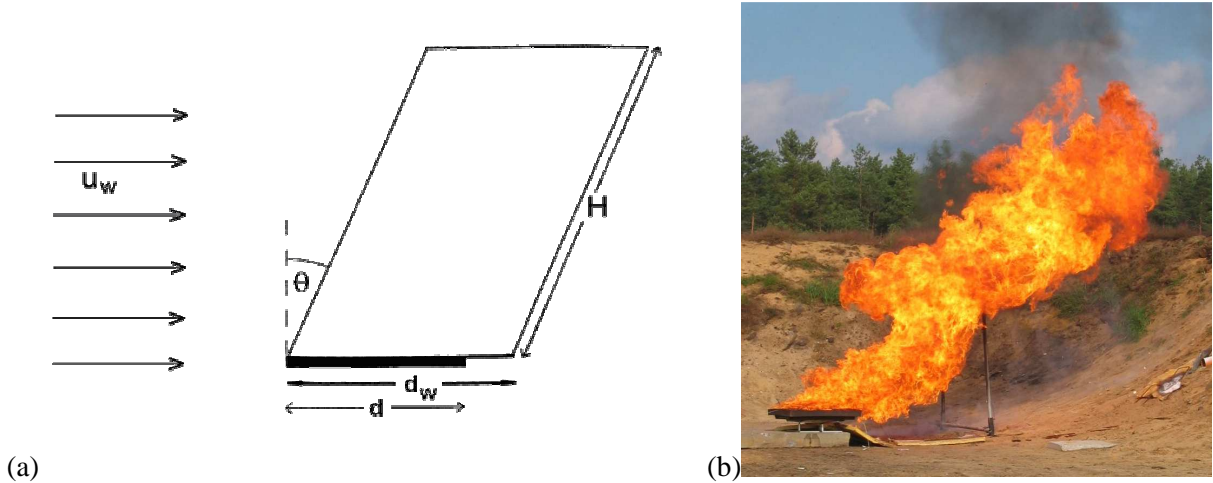
$$\text{Fr} = \frac{\bar{u}_w^2}{g d} \quad (\text{Froude-Zahl}) \quad (2.22)$$

Für größere Flammen gibt Gl. (2.20) den Neigungswinkel  $\theta$  allerdings nur unzureichend wieder. Die Thomas-Korrelation,

$$\cos \bar{\theta} = 0.7 \bar{u}_w^{*-0.49} \quad (2.23)$$



**Abb. 2.8.** Vergleich der nach Thomas [37], Moorhouse [38] und Heskestad [39] berechneten dimensionslosen Flammenlängen  $\bar{H}/d$  mit von Mudan [40] zusammengetragenen Messwerten bei Windstille.



**Abb. 2.9.** Windeinfluss auf die Flamme, schematisch (a) und fotografische Aufnahme (b) einer Poolflamme eines flüssigen, organischen Peroxids aus Feldversuchen der BAM [42]: Die Flamme neigt sich um den Winkel  $\theta$  und der Flammendurchmesser vergrößert sich von  $d$  auf  $d_w$ .

die auf seinen Experimenten an geschichteten Holzfeuern basiert, gibt die experimentellen Werte etwas besser wieder. Eine deutlich bessere Beschreibung liefert allerdings die aus LNG-Feldversuchen hergeleitete Korrelation der American Gas Association [43]:

$$\cos \bar{\theta} = \begin{cases} 1 & \text{für } \bar{u}_w^* \leq 1 \\ 1/\sqrt{\bar{u}_w^*} & \text{für } \bar{u}_w^* \geq 1 \end{cases} \quad (2.24)$$

Die dimensionslose Windgeschwindigkeit  $\bar{u}_w^*$  wurde unter Berücksichtigung der in 1.6 m Höhe gemessenen Windgeschwindigkeit nach Gl. (2.17) berechnet.

#### 2.3.2.4 Flammen-Drag

Der Einfluss des Windes bewirkt nicht nur eine Neigung der Flamme ( $\rightarrow$  Kap. 2.3.2.3), sondern es kommt meist weiterhin zu einer Verbreiterung des Basisdurchmessers. Der Basisdurchmesser  $d_w$  ragt dabei im Lee-Bereich über den Pool mit dem Durchmesser  $d$  hinaus ( $\rightarrow$  Abb. 2.9). Die Annäherung der Flammenoberfläche an benachbarte Objekte kann zu einer deutlich erhöhten Wärmeübertragung führen. Bei relativ großen Windstärken kann es, je nach Abstand, auch zum Aufprallen der Flammen z.B. auf einen Nachbartank kommen.

Für Flammen mit einer rechteckigen Basis bedeutet die Erhöhung des Basisdurchmessers eine Vergrößerung der Fläche, die rechteckige Form der Flamme bleibt aber erhalten. Flammen mit einer runden Basis werden durch den Flammen-Drag nicht nur vergrößert, sie ändern auch ihre Form von kreisrund zu elliptisch. Diese Änderung muss z.B. bei Berechnungen der Bestrahlungsstärke der Flamme berücksichtigt werden, da sich dadurch die Einstrahlzahl ( $\rightarrow$  Kap. 2.8.2.2), die das Winkelverhältnis zwischen der Flamme als Sender und einem beliebigen Empfängerelement beschreibt, entscheidend verändern kann.

Welker und Sliepcevich [41] haben für verschiedene Kohlenwasserstoffe das Verhältnis von verlängertem Basisdurchmesser zum Pooldurchmesser im Windkanal untersucht und geben folgende Korrelation der Ergebnisse an:



$$\frac{d_w}{d} = 2.1 \text{Fr}^{0.21} \left( \frac{\rho_{\text{vap}}}{\rho_u} \right)^{0.48} \quad (2.25)$$

Die Froude-Zahl berechnen sie nach Gl. (2.22).

Moorhouse [38] verwendet zur Ermittlung der Froude-Zahl die Windgeschwindigkeit in einer Höhe von  $x = 10$  m. Mit seiner Korrelation lässt sich eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Flammen-Drags von LNG-Poolflammen verschiedener Pooldurchmesser und Windstärken erzielen:

$$\frac{d_w}{d} = 1.5 \text{Fr}_{10}^{0.069} \quad (2.26)$$

Um die Flammen-Drags anderer Brennstoffe zu beschreiben, kann Gl. (2.26) angepasst werden:

$$\frac{d_w}{d} = 1.25 \text{Fr}_{10}^{0.069} \left( \frac{\rho_{\text{vap}}}{\rho_u} \right)^{0.48} \quad (2.27)$$

## 2.4 Flammentemperaturen

Die Messung von Temperaturen innerhalb von Poolflammen kann direkt mit Thermoelementen erfolgen oder indirekt über die Bestimmung durch Strahlungsmessungen z.B. mit IR-Thermographiesystemen (→ Kap. 3.3) oder auch mit Radiometern [44]. Die unterschiedlichen Methoden bieten dabei jeweils verschiedene Vor- und Nachteile.

Die Messung mit Thermoelementen kann im Prinzip an einer Vielzahl von Punkten innerhalb der Flamme erfolgen und bietet somit die Möglichkeit der Erstellung von Temperaturprofilen in horizontaler (radialer) und vertikaler (axialer) Richtung. Durch den Aufbau einer großen Anzahl von Messsonden und vor allem des dazugehörigen Tragegerüsts kann die Flamme dann aber streng genommen nicht mehr als ungestört angesehen werden. Dennoch wird die Störung häufig in Kauf genommen, da nur mit Sonden punktuelle Messungen auch im Flammeninnern möglich sind (s.u.). Bei Poolflammen mit sehr großen Durchmessern und dementsprechend großen Flammenlängen (→ Kap. 2.3.2.2) ist die Verwirklichung eines Messaufbaus über die gesamte Flammenlänge sehr aufwendig. In solchen Flammen werden daher mit Thermoelementen meist nur die Temperaturen im unteren und mittleren Bereich der Flamme gemessen. Bei der Verwendung von Thermoelementen ist nicht grundsätzlich gewährleistet, dass die Temperatur der Messsonden gleich der umgebenden Gastemperatur ist. Temperaturunterschiede können durch Abkühlung der Sonden aufgrund abgestrahlter Wärme, Wärmeleitung entlang der Leitungen zur Messwerterfassung und Aufheizung durch katalytisch bedingte Reaktionen an der Sondenoberfläche entstehen. Bei sehr hohen Strömungsgeschwindigkeiten wie z.B. in Strahlflammen (→ Kap. 2.1) kann zusätzlich eine aerodynamische Aufheizung vorliegen. Zu träge Thermoelemente können außerdem schnelle Temperaturschwankungen nicht erfassen. Es liegt am Experimentator die Abweichungen zu bestimmen und zu korrigieren bzw. möglichst klein zu halten. Planas-Cuchi and Casal [44] bestimmen beispielsweise die maximalen Flammentemperaturen einer Hexan-Poolflamme bei einer

Pooloberfläche von  $A_P = 4 \text{ m}^2$  mit Thermoelementen zu  $T_{\max} = 957 \text{ K}$  während Bainbridge [45]  $T_{\max} = 1150 \text{ K}$  angibt. Planas-Cuchi and Casal erklären den Unterschied durch die Abkühlung der Sonden aufgrund der abgestrahlten Wärmeenergie und sie kommen in Übereinstimmung mit Gregory et al. [46] zu dem Schluss, dass Thermoelemente aufgrund dieses Effektes in diesem Temperaturbereich generell zu niedrige Messwerte liefern.

Temperaturbestimmungen über Strahlungsmessungen haben generell den Vorteil, dass sie berührungsfrei ablaufen, die Flamme also nicht beeinflussen. Ein Nachteil ist allerdings, dass insbesondere bei großen Poolflammen, die sehr viel Ruß erzeugen und somit als optisch dicht angesehen werden können, lediglich die Strahlung der Flammenoberfläche registriert werden kann. Die Strahlung aus dem Flammeninnern wird durch Absorption in der dichten Rußschicht blockiert.

Im Gegensatz zur punktuellen Messung mit Thermoelementen werden mit IR-Thermographiesystemen Flächen gleicher Strahlung ermittelt, die räumliche Auflösung ist gerätespezifisch. Bei der Temperaturbestimmung über Radiometer kann je nach erfasstem Ausschnitt der Flamme nur ein Mittelwert für relativ große Teile der Flammenoberfläche oder sogar nur für die gesamte Flamme angegeben werden.

Um die Temperatur aus Strahlungsmessungen bestimmen zu können müssen verschiedene Größen bekannt sein. Für die am Empfänger auftreffende Strahlung gilt:

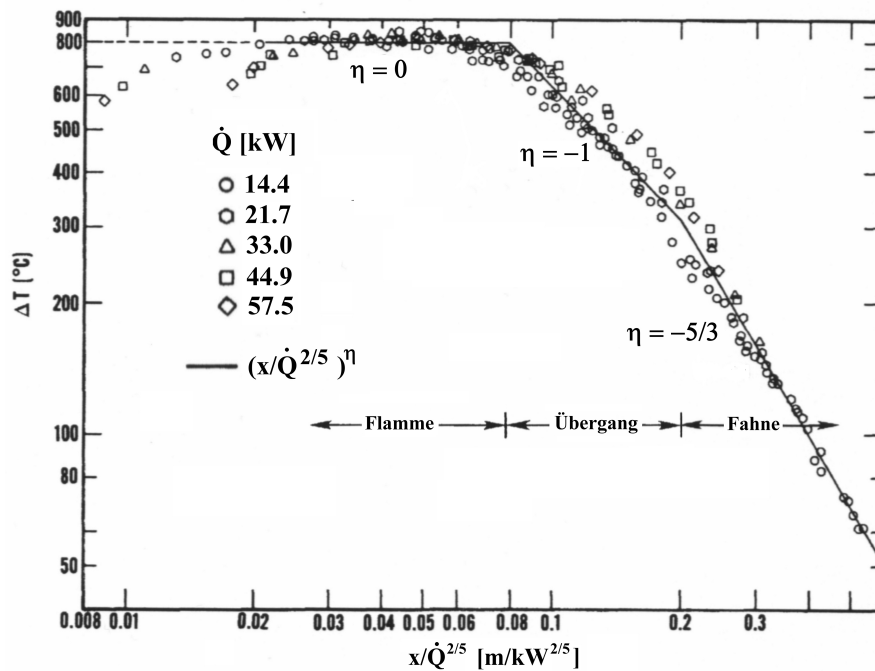
$$I_F = \varepsilon_F \tau_u \sigma (T_F^4 - T_u^4). \quad (2.28)$$

Der Transmissionsgrad  $\tau_u$  der Luft ist in Abhängigkeit von der Luftfeuchtigkeit und weiteren Gaskomponenten wie z.B.  $\text{CO}_2$  tabelliert [47] bzw. kann berechnet werden. Der Emissionsgrad großer Flammen ( $d > 1 \text{ m}$ ) wird meist als  $\varepsilon_F = 1$  angenommen. Prinzipiell ist  $\varepsilon_F$  aber abhängig vom Pooldurchmesser und vom Brennstoff. Planas-Cuchi et al. [48] zeigen mit Versuchen an Benzin- und Dieselflammen mit Pooldurchmessern  $0.13 \text{ m} \leq d \leq 0.5 \text{ m}$ , dass sich in diesem Bereich mit abnehmendem Pooldurchmesser das Emissionsvermögen deutlich verringert. Die Emissionsstärke scheint sich aber auch hier mit zunehmenden Pooldurchmesser dem Wert  $\varepsilon_F = 1$  anzunähern. Der Einfluss des Brennstoffs ist bei ihren Versuchen so gering, dass er vernachlässigt werden kann.

Die Temperaturen innerhalb einer Flamme hängen generell von vielen Faktoren ab, wie z.B. vom Brennstoff, vom Pooldurchmesser und auch von den Windverhältnissen. Die maximal freigesetzte Wärmemenge einer Flamme ist gegeben durch

$$\dot{Q} = \dot{m}_f'' \Delta h_c A_P. \quad (2.29)$$

Nach McCaffrey [49] lassen sich die Temperatur- und auch die Geschwindigkeitsprofile ( $\rightarrow$  Kap. 2.5) entlang der Flammenachse bei unterschiedlichen Werten für  $\dot{Q}$  skalieren, wenn die Höhe als  $x/\dot{Q}^{2/5}$  und die Strömungsgeschwindigkeit als  $u/\dot{Q}^{1/5}$  normiert werden. Die Faktoren  $\dot{Q}^{2/5}$  und  $\dot{Q}^{1/5}$  sind rein empirische Werte die aus seinen Experimenten mit einem quadratischen Erdgasbrenner mit  $0.3 \text{ m}$  Kantenlänge resultieren. Die Wärmefreisetzungsrate  $\dot{Q}$  stellt er durch Variation des Brennstoffstroms ein. Aufgrund der Messergebnisse teilt McCaffrey die Regionen in und über der Flamme in die untere, andauernde Flammenzone,



**Abb. 2.10.** Messergebnisse und Korrelation der Flammentemperatur entlang der Flammenachse nach McCaffrey [49] für verschiedene Wärmefreisetzungsraten  $\dot{Q}$ .

die darüber liegende Übergangszone und die anschließende Flammenfahne. Seine Korrelation für die Temperaturdifferenz entlang der Flammenachse lautet

$$\frac{2g \Delta T}{T_0} = \left( \frac{k}{C} \right)^2 \left( \frac{x}{\dot{Q}^{2/5}} \right)^{2\eta-1} \quad (2.30)$$

Die normierte Höhe  $x/\dot{Q}^{2/5}$  bestimmt die Region, die Konstanten für die einzelnen Regionen sind in Tab. 2.3 aufgeführt. Gleichung (2.30) zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit McCaffreys Messergebnissen ( $\rightarrow$  Abb. 2.10) und wird daher oftmals zur Validierung von Simulationen [50] herangezogen. McCaffrey gibt außerdem eine Korrelation für die Strömungsgeschwindigkeiten an der Flammenachse an. Diese ist im folgenden Kapitel aufgeführt. Der Vergleich der Ergebnisse dieser Arbeit mit McCaffreys Korrelationen erfolgt in Kap. 6.5.2 und Kap. 6.5.4.

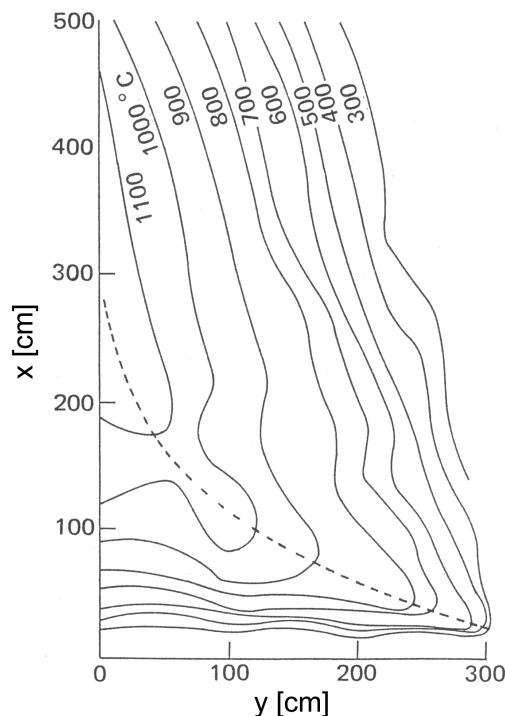
**Tab. 2.3.** Zahlenwerte für die verschiedenen Zonen in McCaffreys Korrelationen [49].

Zone	k	$\eta$ [-]	$x/\dot{Q}^{2/5}$ [m/kW <sup>2/5</sup> ]	C [-]
Flammenzone	6.8 m <sup>1/2</sup> /s	0.5	< 0.08	0.9
Übergangszone	1.9 m/(s kW <sup>1/5</sup> )	0.0	0.08 – 0.2	0.9
Flammenfahne	1.1 m <sup>4/3</sup> /(s kW <sup>1/3</sup> )	-1/3	> 0.2	0.9

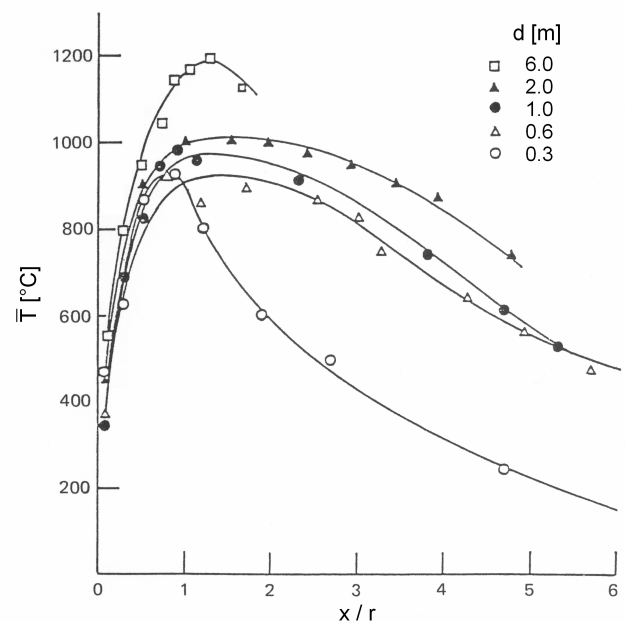
Um einen detaillierten Einblick in die Temperaturverteilung einer Flamme zu gewinnen sind zwei- oder dreidimensionale Temperaturfelder vonnöten. Diese ermöglichen auch die Zuordnung von Temperaturen zu bestimmten kohärenten Flammenstrukturen ( $\rightarrow$  Kap. 2.7). Abb. 2.11 zeigt die von Koseki [51] mit Thermoelementen gemessene axiale und radiale Temperaturverteilung innerhalb einer Heptan-Poolflamme mit  $d = 6$  m bzw.  $r = 3$  m, die als exemplarisch für andere Heptanflammen mit Pooldurchmessern  $0.3 \text{ m} \leq d \leq 6 \text{ m}$  gelten kann. Da im unteren Bereich unverbrannte und noch relativ kalte Brennstoffdämpfe vom Pool aufsteigen, liegen hier deutlich niedrigere Temperaturen vor als in etwas größeren dimensionslosen Höhen um  $0.6 \leq x/r \leq 1.7$ . Mit zunehmendem radialem Abstand nehmen die mittleren Temperaturen ab, wobei die Temperaturgradienten zum Poolrand hin größer werden.

Die Abhängigkeit der zeitlich gemittelten Temperatur an der Flammenachse vom Pooldurchmesser sowie von der Höhe über dem Pool ist in Abb. 2.12 ersichtlich. Die Flammentemperaturen sind unkorrigiert, d.h. eine Berücksichtigung der Wärmeverluste der Thermoelemente durch Strahlung erfolgte nicht [51]. Die mittleren Temperaturen steigen mit zunehmendem Pooldurchmesser bis auf  $\bar{T}_{\max} \approx 1473 \text{ K}$  bei  $d = 6 \text{ m}$  an. Eine Ausnahme bildet lediglich die kleinste Flamme mit  $d = 0.3 \text{ m}$ , die geringfügig höhere Temperaturen als die Flamme mit  $d = 0.6 \text{ m}$  erreicht. Das Maximum der mittleren Temperatur wird bei allen Flammen außer wiederum bei der Kleinsten in dimensionslosen Höhen  $1.3 \leq x/r \leq 1.6$  erreicht.

Ähnliche Temperaturprofile entlang der Flammenachse und in radialer Richtung werden auch von Planas-Cuchi et al. [52] für Benzin- und Diesel-Poolflammen mit  $1.5 \text{ m} \leq d \leq 4 \text{ m}$  gemessen. Das Maximum der mittleren Temperatur  $\bar{T}_{\max} \approx 1223 \text{ K}$  liegt jedoch bei  $x/r \approx 0.25$ , also deutlich niedriger als bei Kosekis Experimenten. Während Koseki in einer



**Abb. 2.11.** Isothermen in einer Heptan-Poolflamme ( $d = 6 \text{ m}$ ) nach Koseki [51].

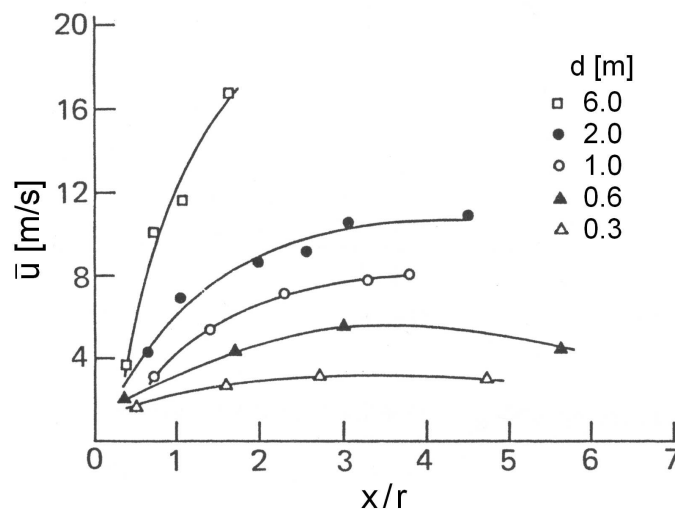


**Abb. 2.12.** Mittlere Flammentemperaturen entlang der Flammenachse von Heptan-Poolflammen in Abhängigkeit vom Pooldurchmesser  $d$  [51].

relativen Höhe von  $x/r = 2$  Temperaturen knapp unter dem Maximum registriert, verzeichnen Planas-Cuchi et al. in der gleichen relativen Höhe einen deutlichen Abfall auf  $\bar{T} \approx 573$  K. Der Unterschied ist möglicherweise in den physikalischen Eigenschaften der verschiedenen Brennstoffe begründet. Während Benzin und Heptan mit  $\Delta h_{c,\text{Benzin}} = 43$  MJ/kg und  $\Delta h_{c,\text{Heptan}} = 44.7$  MJ/kg zwar eine fast identische Verbrennungsenthalpie besitzen, unterscheiden sich ihre Massenabbrandraten mit  $\dot{m}''_{\text{Benzin}} \approx 0.05$  kg/(m<sup>2</sup> s) und  $\dot{m}''_{\text{Heptan}} = 0.101$  kg/(m<sup>2</sup> s) fast genau um den Faktor 2.

## 2.5 Strömungsgeschwindigkeiten

In Poolflammen mit kleinen Durchmessern  $d \ll 1$  m werden zur Bestimmung der Strömungsgeschwindigkeiten die Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) [53] oder auch häufig die Particle Image Velocimetry (PIV) [54-56] herangezogen. Bei beiden Methoden werden der Flamme kleine Partikel beigemischt, deren Geschwindigkeiten innerhalb der Flamme leicht bestimmt werden können. Dabei wird angenommen, dass die Partikelgeschwindigkeit gleich der jeweiligen, örtlichen Strömungsgeschwindigkeit in der Flamme ist. Bei der LDA-Methode werden die Geschwindigkeiten punktuell über die von den bewegten Partikeln verursachten Frequenzverschiebungen beim eingestrahnten Laser-Licht ermittelt (Doppler-Effekt). Bei der PIV-Methode hingegen werden die Partikel durch die Energie innerhalb der Ebene eines aufgeweiteten Laser-Strahls zur Fluoreszenz angeregt, und deren Bewegungsgeschwindigkeit sowie -richtung kann über digitale Bildauswertung bestimmt werden. Beide Methoden sind in großen Poolflammen aufgrund der Dimensionen und vor allem der meist sehr hohen Rußpartikeldichte, wodurch ein Großteil der Strahlung absorbiert wird, nicht praktikabel. Durch Filmaufzeichnungen des VIS-Bereiches der Flammen und anschließende digitale Bildanalyse können jedoch die Geschwindigkeiten kohärenter Strukturen wie z.B. Rußballen ( $\rightarrow$  Kap. 2.7.2) an der Flammenoberfläche bestimmt werden [24,57-60]. Die Aufstiegsgeschwindigkeiten solcher Strukturen sind jedoch in der Regel nicht gleichzusetzen mit den örtlich herrschenden Strömungsgeschwindigkeiten, sondern spiegeln nur qualitativ die Strömungen an



**Abb. 2.13.** Mittlere Strömungsgeschwindigkeiten entlang der Flammenachse in Abhängigkeit vom Pooldurchmesser  $d$  nach Koseki [51].

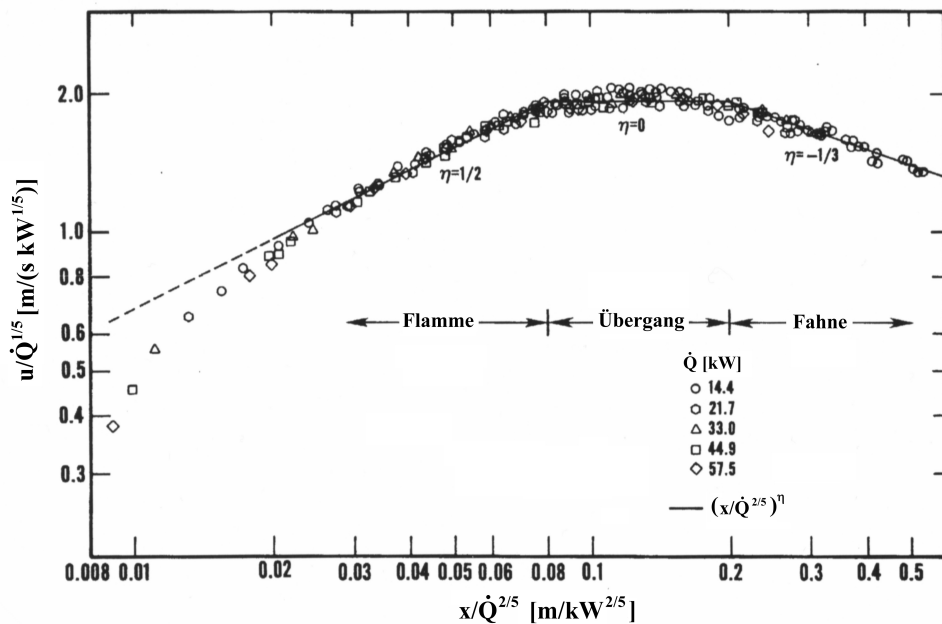
der Flammenoberfläche wieder.

In großen Poolflammen werden die Strömungsgeschwindigkeiten in der Regel über Druckdifferenzmessungen bestimmt. Diese Methode liefert die Geschwindigkeiten in vertikaler Richtung. Geschwindigkeitsfelder wie bei der PIV, die auch Aussagen über die Strömung in horizontaler Richtung liefert, werden hier nicht ermittelt. Generell wird in großen Poolflammen mit zunehmendem Pooldurchmesser ein Anstieg der vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten verzeichnet. Koseki [51] ermittelt beispielsweise in Heptan-Poolflammen eine Zunahme der Maxima der zeitlich gemittelten Geschwindigkeiten an der Flammenachse von  $\bar{u}_{\max} \approx 3 \text{ m/s}$  für  $d = 0.3 \text{ m}$  bis  $\bar{u}_{\max} \approx 17 \text{ m/s}$  für  $d = 6 \text{ m}$  ( $\rightarrow$  Abb. 2.13). Der tatsächliche Maximalwert für  $d = 6 \text{ m}$  lag aber vermutlich noch höher, da in den Experimenten nicht der gesamte Höhenbereich dieser Flamme mit Messsonden abgedeckt werden konnte und das tatsächliche Maximum außerhalb des erfassten Bereiches lag. In Kosekis Ergebnissen zeigt sich eine deutliche Proportionalität der mittleren vertikalen Geschwindigkeit  $\bar{u}$  zur Quadratwurzel des Pooldurchmessers  $d$ .

Wie in Kap. 2.4 beschrieben, lassen sich nach McCaffrey [49] sowohl die Temperaturen als auch die Strömungsgeschwindigkeiten entlang der Flammenachse von Poolflammen mit unterschiedlichen Wärmefreisetzungsraten  $\dot{Q}$  vergleichen, wenn die Höhe als  $x/\dot{Q}^{2/5}$  und die Strömungsgeschwindigkeit als  $u/\dot{Q}^{1/5}$  normiert werden. Für die Strömungsgeschwindigkeit gilt dann:

$$\frac{u}{\dot{Q}^{1/5}} = k \left( \frac{x}{\dot{Q}^{2/5}} \right)^\eta \quad (2.31)$$

Die Konstanten  $k$  und  $\eta$  sind in Tab. 2.3 aufgeführt. Abb. 2.14 verdeutlicht, dass die Messergebnisse mit Gl. (2.31) sehr gut wiedergegeben werden.



**Abb. 2.14.** Messergebnisse und Korrelationen der Strömungsgeschwindigkeiten entlang der Flammenachse nach McCaffrey [49] für verschiedene Wärmefreisetzungsraten  $\dot{Q}$ .

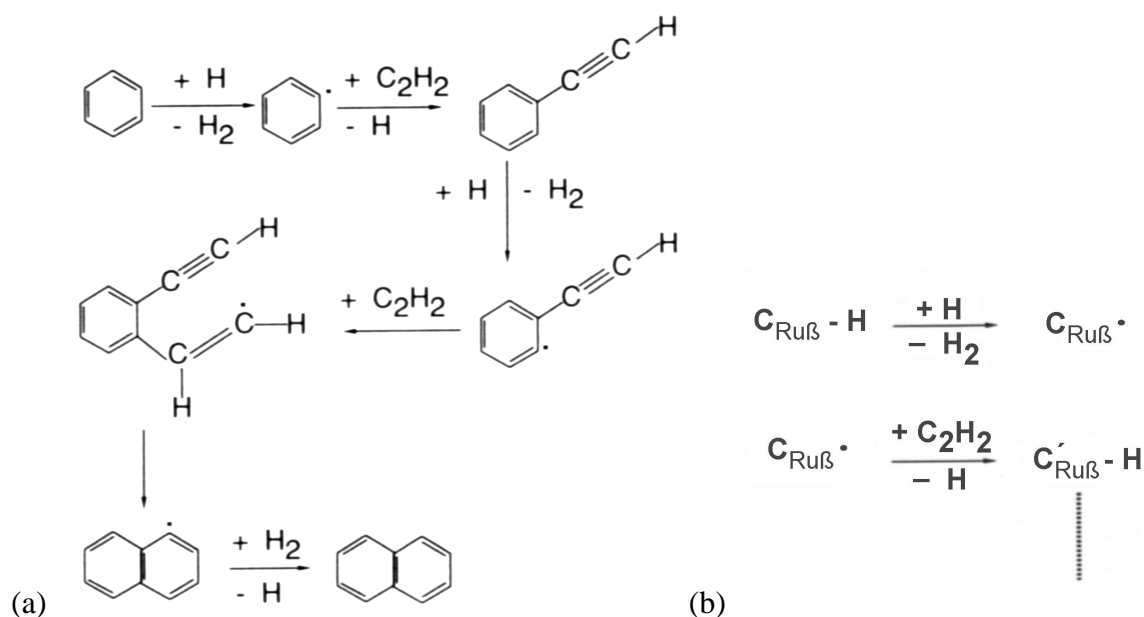
## 2.6 Ruß

In Bereichen, in denen eine nicht ausreichende Durchmischung von Brennstoff und Oxidationsmittel erfolgt, wird neben den gasförmigen Spezies Ruß als Verbrennungsprodukt gebildet. Dem Ruß kommt als Partikelstrahler insbesondere im Hinblick auf die Wärmestrahlung der Flamme eine besondere Bedeutung zu. Der Begriff Ruß umfasst allerdings ein weites Feld von Partikeln, die keine identische chemische Struktur und dementsprechend zum Teil deutlich unterschiedliche Eigenschaften besitzen. Diese Unterschiede sind auf die verschiedenen Prozesse während der Rußbildung zurückzuführen.

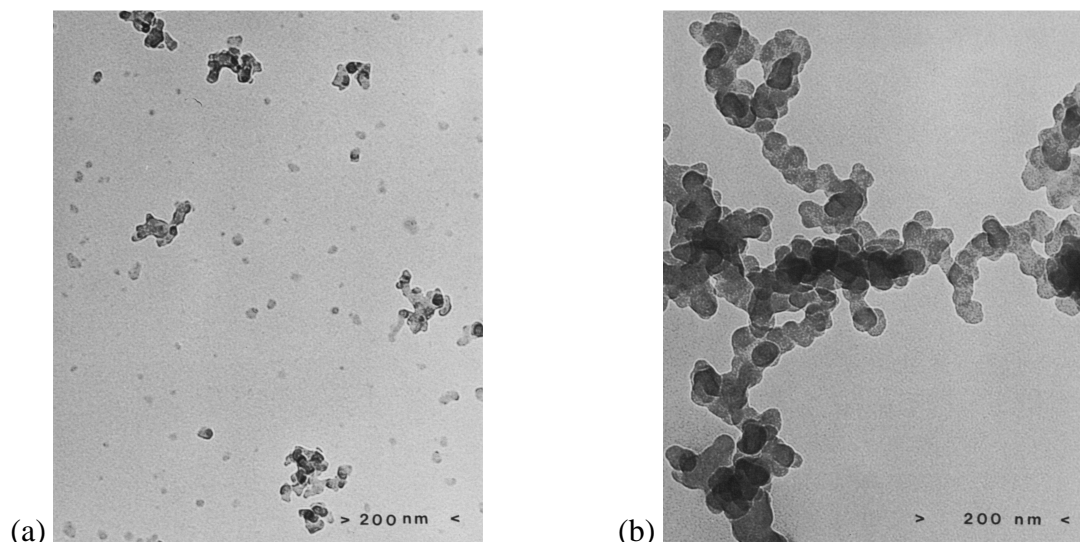
Bis heute liegt kein vollständiges Verständnis aller der Rußbildung zugrunde liegenden Prozesse bzw. Reaktionen vor. Einigkeit herrscht jedoch beim allgemeinen Ablauf der Rußbildung, es treten folgende Prozesse in Erscheinung:

- Keimbildung
- Entstehung von Primärpartikeln
- Oberflächenwachstum
- Koagulation
- Oxidation

In der Gasphase wird zunächst der Brennstoff in kleinere Moleküle bzw. Radikale aufgespalten. Die unterschiedlichen Zwischenprodukte können miteinander reagieren und sich zu polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK, polycyclic aromatic hydrocarbons: PAH) zusammenschließen. Die PAK gelten als Vorläufer der Keime. Der Bildungsmechanismus der PAK kann je nach Brennstoff über unterschiedliche Reaktionen erfolgen [61], bei flüssigen Brennstoffen ist jedoch stets eine Beteiligung des Acetylens zu beobachten. Der Ringaufbau und das anschließende Ringwachstum kann als eine wiederholte Abspaltung von



**Abb. 2.15.** (a) HACA-Mechanismus beim planaren PAK-Wachstum und (b) Erweiterung auf das Oberflächenwachstum der Rußpartikel nach Bockhorn [62].



**Abb. 2.16.** Elektronenmikroskopische Aufnahmen der Rußpartikel in einer Ethanflamme im unteren (a) bzw. im oberen (b) Flammenbereich [71].

Wasserstoff und Addition von Acetylen aufgefasst werden ( $\rightarrow$  Abb. 2.15a) und wird daher als HACA-Mechanismus bezeichnet (hydrogen abstraction, carbon addition) [62]. Mit fortschreitendem Prozess entstehen auf diese Weise Keime in Form von größeren zweidimensionalen Ringsystemen, die hauptsächlich aus hexagonalen Ringen zusammengesetzt sind [63]. Neben der Addition von Acetylen kann aber auch die Addition weiterer, bereits gebildeter Ringsysteme erfolgen. Diese Koagulation wird als entscheidender Schritt beim Übergang vom Keim zum dreidimensionalen Primärpartikel angesehen [64].

Mit dem Altern bzw. dem Aufstieg der Partikel in größere Höhen treten vermehrt die Prozesse des Oberflächenwachstums, der Rußoxidation und weiterhin der Koagulation auf. Das Oberflächenwachstum kann wiederum als Addition von Acetylen aufgefasst werden ( $\rightarrow$  Abb. 2.15b) [62]. Diese fortwährend ablaufenden Prozesse führen zu einer deutlich abnehmenden Oberflächenaktivität der Rußpartikel [65]. Der zeitabhängigen Oberflächenaktivität kann z.B. in Modellierungen ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.3) Rechnung getragen werden.

Die Rußoxidation kann jederzeit parallel zur Rußbildung ablaufen. Als maßgeblicher Prozess findet die Rußoxidation bei hohen Temperaturen und hohen Sauerstoffpartialdrücken statt [66]. Ihr Maximum erreicht die Oxidationsrate in Umgebungsluft bei ca. 2000 K [67,68]. Neben dem  $O_2$ -Molekül können auch O-Radikale und vor allem OH-Radikale zur Oxidation beitragen [69,70]. Durch Oxidation kann der entstandene Ruß bei entsprechenden Bedingungen nahezu vollständig wieder in Kohlenstoffdioxid und Wasser umgewandelt werden. Dies macht man sich bei der Nachverbrennung zur Immissionsverminderung zu Nutze.

Aus den ablaufenden Prozessen ergibt sich, dass sich die Eigenschaften älterer Rußpartikel deutlich von denen Jüngerer unterscheiden. So besitzen Keime und Primärpartikel noch einen relativ hohen Wasserstoffanteil, der mit zunehmendem Alter abnimmt. Dobbins [63,71] hat die Rußpartikel einer Ethenflamme in verschiedenen Höhen elektronenmikroskopisch untersucht. Im unteren Teil bis  $h = 150$  mm findet er hauptsächlich Primärpartikel und junge Rußpartikel ( $\rightarrow$  Abb. 2.16a). Die Primärpartikel besitzen eine Größe von etwa 35 nm und erscheinen in der TEM-Aufnahme (transmission electron micrograph) deutlich transparenter als



z.B. ältere und größere Rußpartikel ( $\rightarrow$  Abb. 2.16b). Die älteren Partikel, die in einer Höhe von 330 mm der Flamme entnommen wurden, sind sehr große Aggregate bestehend aus kettenförmig aneinander gekoppelten, monodispersen Primärpartikeln. Der Durchmesser der gebundenen Primärpartikel ist gleich dem der freien Primärpartikel und beträgt also etwa 35 nm. Der Einfluss auf die Primär- und Rußpartikel durch den Brennstoff, den Flammentyp oder andere Randbedingungen ist relativ gering. Dobbins findet beispielsweise für Methan und Ethen gleiche Primärpartikel, lediglich die Primärpartikel einer Acetylenflamme sind mit einem Durchmesser von 45 nm etwas größer [71].

## 2.7 Kohärente Strukturen

In Poolflammen mit Pooldurchmessern  $d > 1$  m lassen sich verschiedene Strukturtypen klassifizieren ( $\rightarrow$  Abb. 2.17), die sich vor allem in ihrer Temperatur und ihrer Wärmestrahlung voneinander unterscheiden. Einige Modelle zur Berechnung der Wärmestrahlung berücksichtigen u.a. die unterschiedlichen Strahlungseigenschaften der Strukturen ( $\rightarrow$  Kap. 2.8), daher werden diese Unterschiede in den folgenden Kapiteln herausgestellt.

### 2.7.1 Helle Verbrennungszone

Die helle Verbrennungszone (clear zone, luminous zone), die auch manchmal als Flammenbasis bezeichnet wird, ist direkt über der Brennstoffoberfläche lokalisiert ( $\rightarrow$  Abb. 2.17). In ihr erfolgt eine gute Durchmischung von Brennstoffdämpfen und Luftsauerstoff. Das günstige Verhältnis von Sauerstoff zu Brennstoff führt zu hohen Reaktionsgeschwindigkeiten, so dass ein großer Teil der Verbrennungsenthalpie hier freigesetzt wird. Daher treten in der hellen Verbrennungszone dauerhaft hohe Temperaturen im Bereich  $873 \leq T_{cl} \leq 1413$  K auf und es

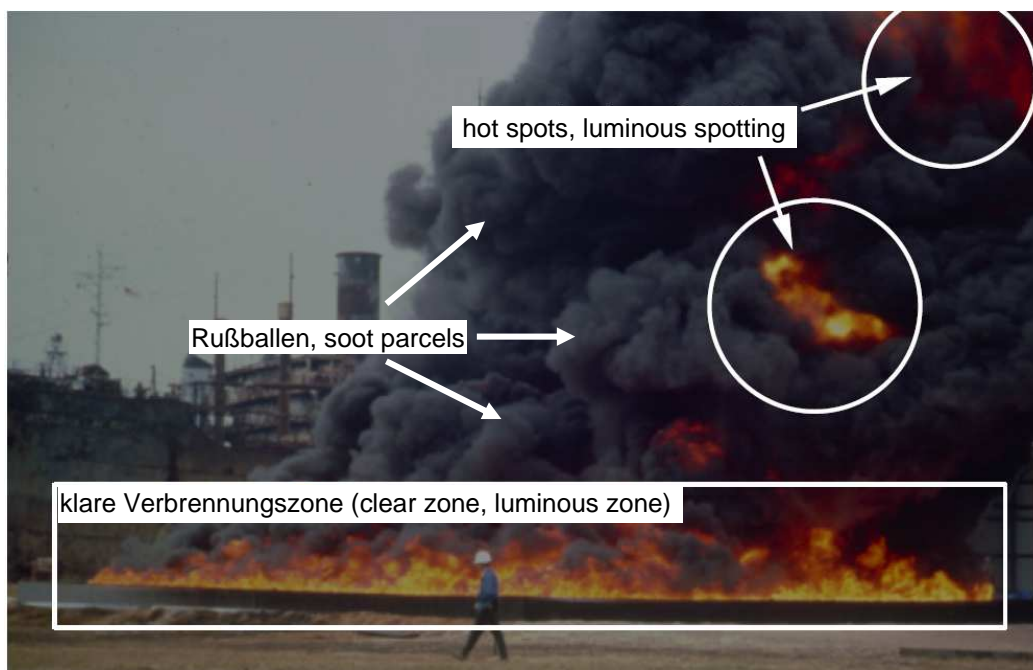


Abb. 2.17. Strukturtypen in einer Diesel-Poolflamme mit  $d = 15$  m [73].

liegt eine hohe spezifische Ausstrahlung von  $33 \text{ kW/m}^2 \leq \text{SEP}_{\text{cl}} \leq 430 \text{ kW/m}^2$  vor [86]. Die helle Verbrennungszone erscheint dem Betrachter als leuchtender Ring um den Fuß der Flamme, ihre Höhe schwankt in rußenden Flammen je nach Brennstoff zwischen  $0.1d$  und  $0.3d$  [24].

### 2.7.2 Rußballen

Rußballen erscheinen dem Betrachter als graue bis schwarze Wirbelstrukturen. Der Anteil der Rußballen an der Flammenoberfläche hängt stark vom Brennstoff und dem Pooledurchmesser ab. Es können sich Flammen bilden, in denen, wie beispielsweise in der Peroxid-Poolflamme in Abb. 2.9b, nahezu keine Rußballen auftreten. In großen Poolflammen typischer Brennstoffe wie Benzin, Kerosin oder Diesel bilden sich jedoch Rußballen meist im überwiegenden Bereich der Flamme aus ( $\rightarrow$  Abb. 2.17). In solchen stark rußenden Flammen beginnt ihre Entstehung unmittelbar über der hellen Verbrennungszone. Aufgrund der Abkühlung der heißen Rußpartikel durch die Umgebungsluft bildet sich an der Flammenoberfläche eine Schicht aus relativ kalten, nicht leuchtenden Rußpartikeln. Der Temperaturbereich der Rußballen wurde von Göck [86] mit Hilfe eines IR-Thermografiesystems als  $523 \text{ K} \leq T_{\text{RB}} < 873 \text{ K}$  ermittelt.

Rußballen sind stark absorbierende Strukturen. Als Festkörper absorbieren und emittieren die Rußpartikel über das kontinuierliche Spektrum. Dabei wird ein Teil der absorbierten Strahlungsenergie in Wärmeenergie umgewandelt und führt zu einer kleinen Temperaturerhöhung der Rußpartikel. Der übrige Teil der zuvor absorbierten Strahlungsenergie wird wieder emittiert. Somit wird ein bedeutender Teil der aus dem Flammeninnern ausgesandten Strahlung durch die Rußballen blockiert. Im Vergleich zur hellen Verbrennungszone ( $\rightarrow$  Kap. 2.7.1) und zu den hot spots ( $\rightarrow$  Kap. 2.7.3) besitzen die Rußballen eine relativ schwache spezifische Ausstrahlung im Bereich von  $33 \text{ kW/m}^2 \leq \text{SEP}_{\text{RB}} \leq 50 \text{ kW/m}^2$  [86]. Der meist mit zunehmendem Pooledurchmesser ansteigende Rußanteil verstärkt den Effekt der Strahlungsblockade, was für viele Brennstoffe eine Abnahme der flächenbezogenen Ausstrahlung der Flamme zur Folge hat.

### 2.7.3 Hot spots

Der hot spot ist eine Struktur mit sehr hohen spezifischen Ausstrahlungen. Als hot spot wird ein nach außen sichtbarer Bereich hoher Temperatur bzw. Strahlungsintensität oberhalb der hellen Verbrennungszone bezeichnet. Er entsteht beispielsweise, wenn heiße Verbrennungsgase aus dem Flammeninnern aufgrund ihrer hohen Geschwindigkeit die Rußschicht durchbrechen oder durch Verschiebung der Rußballen die Sicht auf einen Teil des Flammeninneren ermöglicht wird. Hot spots stellen wie die Rußballen ein Gemisch aus Flammgasen und Rußpartikeln dar, ihre Temperaturen sind jedoch wesentlich höher. Mit  $873 \leq T_{\text{hs}} \leq 1413 \text{ K}$  [86] gleichen sie denen der hellen Verbrennungszone. Aufgrund der hohen Temperaturen entwickeln diese Strukturen hohe Auftriebskräfte bzw. Aufstiegsgeschwindigkeiten von z.T.  $u_{\text{hs,max}} > 20 \text{ m/s}$ . Ihre Lebensdauer ist daher im Gegensatz zu den vergleichsweise langsamen Rußballen deutlich geringer. Aufgrund ihrer hohen spezifischen Ausstrahlung von  $33 \text{ kW/m}^2 \leq \text{SEP}_{\text{hs}} \leq 430 \text{ kW/m}^2$  können sich jedoch die durch hot spots bedingten, kurzzeitigen Strahlungsmaxima auf Menschen schädlich auswirken.

## 2.8 Wärmestrahlung

Zur Beschreibung der Wärmestrahlung großer Poolflammen sind verschiedene stationäre, semi-empirische Modelle entwickelt worden, die sich in zwei Kategorien einteilen lassen. Die Mehrzahl der Modelle beschreibt die von der Flammeoberfläche ausgehende mittlere spezifische Ausstrahlung. Daraus kann in einem weiteren Schritt die mittlere Bestrahlungsstärke auf andere Objekte ermittelt werden. Im Gegensatz dazu wird mit dem Punktquellen-Strahlungsmodell die auf ein Objekt außerhalb der Flamme auftreffende mittlere Bestrahlungsstärke direkt berechnet. Die verschiedenen Berechnungsmethoden werden im Folgenden dargelegt.

### 2.8.1 Mittlere spezifische Ausstrahlung

#### 2.8.1.1 Konventionelles und modifiziertes Zylinderflammen-Strahlungsmodell

Ein sehr weit verbreitetes Modell zur Berechnung der mittleren spezifischen Ausstrahlung ist das Zylinderflammen-Strahlungsmodell (ZFS, solid flame model: SFM) [6,72,73]. Die Flamme wird bei diesem Modell als ein gleichmäßig strahlender Zylinder angesehen ( $\rightarrow$  Abb. 2.18). Der Zylinderdurchmesser ist gleich dem Pooldurchmesser  $d$ , die Zylinderhöhe wird gleich der mittleren Flammenlänge  $\bar{H}$  angenommen. Die mittlere spezifische Ausstrahlung  $\overline{SEP}_{ZFS}$  lässt sich wie folgt berechnen:

$$\overline{SEP}_{ZFS} = \bar{\epsilon}_F \sigma (\bar{T}_F^4 - T_u^4) . \quad (2.32)$$

Die Flamme wird als optisch dichtes, grau strahlendes Medium mit einem Emissionsgrad von  $\bar{\epsilon}_F = 0.95$  angesehen und es wird eine mittlere Flammentemperatur  $\bar{T}_F = 1173$  K festgesetzt [72]. Einsetzen dieser beiden Werte in Gl. (2.32) ergibt eine konstante mittlere spezifische Ausstrahlung von  $\overline{SEP}_{ZFS} = 100 \text{ kW/m}^2$ . Das Modell gibt die experimentell gefundenen Abhängigkeiten vom Brennstoff und vor allem vom Pooldurchmesser ( $\rightarrow$  Abb. 2.21) nicht wieder, sondern liefert eine grobe Abschätzung der maximalen spezifischen Ausstrahlung. Es wird bisher für konservative Vorhersagen verwendet.

Allgemein berechnet sich die mittlere spezifische Ausstrahlung eines Poolfeuers in Abhängigkeit vom Pooldurchmesser  $d$  und dem Brennstoff  $f$  nach

$$\overline{SEP}(d, f) = \bar{f}_{\text{rad}}(d) \overline{SEP}_{\text{theor}} , \quad (2.33)$$

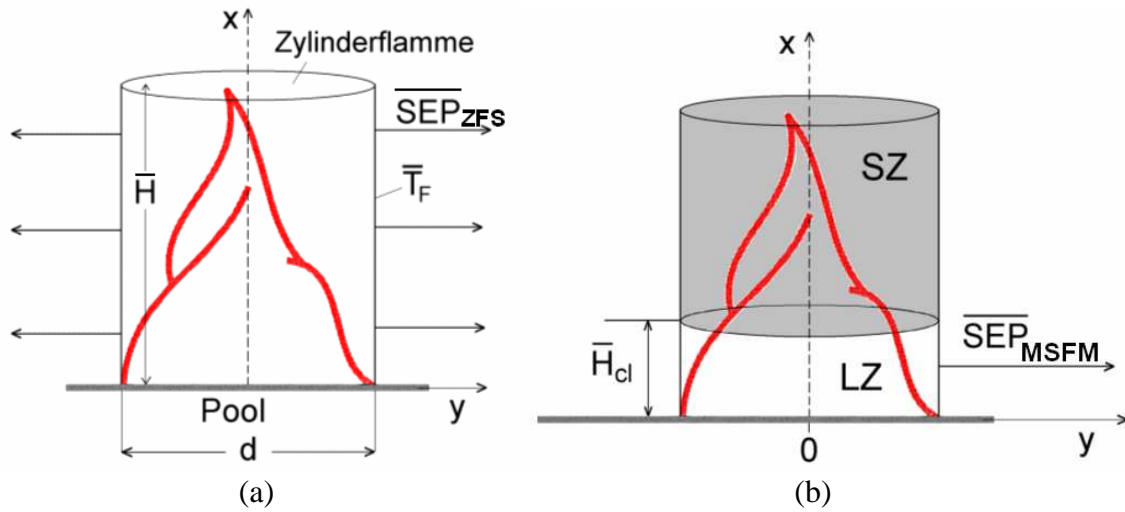
mit

$$\overline{SEP}_{\text{theor}} = \bar{m}_f'' (-\Delta h_c) \frac{A_P}{A_F} \equiv \bar{q}_f'' \frac{A_P}{A_F} . \quad (2.34)$$

Bei einer als zylinderförmig angenommenen Flamme gilt für die Oberfläche

$$\bar{A}_F = \pi d \bar{H}(d) + \frac{\pi d^2}{4} , \quad (2.35)$$

und somit



**Abb. 2.18.** Zylinderflammenmodelle [74]: (a) ZFS: Die Flamme wird als gleichmäßig strahlender Zylinder angesehen; (b) MSFM: die Flamme wird in eine hell leuchtende und somit strahlende Zone (LZ) und in eine nicht strahlende Zone (SZ) eingeteilt.

$$\overline{\text{SEP}}(d, f) = \frac{\bar{f}_{\text{rad}}(d) \bar{q}_f''}{4\bar{H}(d)/d + 1} . \quad (2.36)$$

Die mittlere spezifische Ausstrahlung hängt somit von der nur sehr schwer zu bestimmenden Flammenoberfläche und dem ebenfalls nur schwer zu berechnenden mittleren Strahlungsanteil  $\bar{f}_{\text{rad}}$  ab. Als Korrelation wird oftmals

$$f_{\text{rad}}(d) = f_{\text{rad, max}} e^{-kd} , \quad (2.37)$$

mit  $f_{\text{rad, max}} = 0.35$  und dem Absorptionskoeffizienten  $k = 0.05 \text{ m}^{-1}$  angenommen.

McGrattan, Baum und Hamins [73] wandeln das Zylinderflammen-Modell ab (modified solid flame model, MSFM), indem sie die Flamme in zwei Zonen einteilen. Sie nehmen an, dass der Strahlungsanteil  $\bar{f}_{\text{rad}}$  der totalen Wärmefreisetzungsrate nur von der hellen Verbrennungszone ( $\rightarrow$  Kap. 2.7.1) ausgeht. Die emittierende Oberfläche ist demnach  $\bar{A}_F = \pi d \bar{H}_{\text{cl}}(d)$  und Gl. (2.36) ändert sich zu

$$\overline{\text{SEP}}_{\text{MSFM}}(d, f) = \frac{\bar{f}_{\text{rad}}(d)}{4\bar{H}_{\text{cl}}(d)/d} . \quad (2.38)$$

Die dimensionslose Höhe des mit  $\overline{\text{SEP}}_{\text{MSFM}}$  emittierenden Zylinders ( $\rightarrow$  Abb. 2.18b) ist nun nicht gleich der mittleren Flammenlänge sondern

$$\bar{H}_{\text{cl}}(d)/d = \frac{\bar{f}_{\text{rad, cl}}(d) \bar{q}_f''}{4\overline{\text{SEP}}_{\text{LZ}}} . \quad (2.39)$$

Die spezifische Ausstrahlung der leuchtenden Verbrennungszone wird auf  $\overline{\text{SEP}}_{\text{LZ}} = 100 \text{ kW/m}^2$  festgelegt.

Nach Gl. (2.39) ergibt sich für  $\bar{H}_{cl}$  ein Maximum bei  $d = 20$  m, danach fallen die Werte wieder ab. Die Autoren nehmen jedoch an, dass sich die Höhe der hellen Verbrennungszone ab  $d = 20$  m nicht mehr ändert. Für Flammen mit  $d \geq 20$  m empfehlen sie daher die Berechnung von  $\bar{H}_{cl}$  mit  $d = 20$  m,  $\bar{f}_{rad} = 0.35$  und  $k = 0.05 \text{ m}^{-1}$ :

$$\bar{H}_{cl} = \frac{0.35e^{-1} \cdot 20 \bar{q}_f''}{4 \cdot 100} \approx 6.4 \cdot 10^{-3} \bar{q}_f'' . \quad (2.40)$$

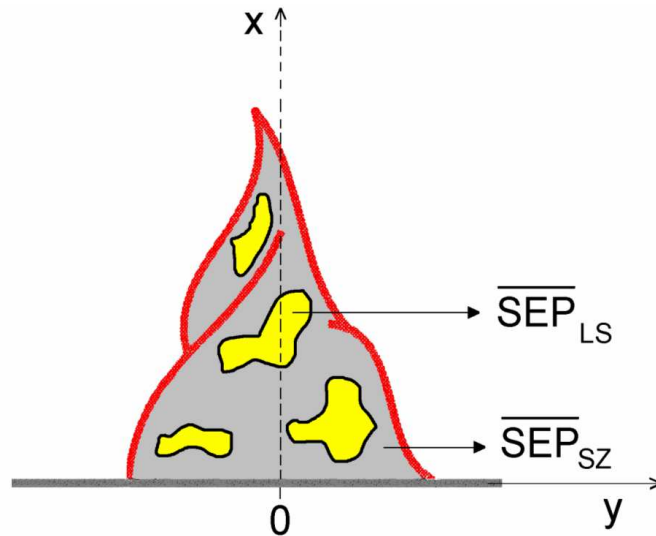
Die Zylinderhöhe ist also nur noch vom Wärmestrom pro Fläche  $\bar{q}_f''$  abhängig. Dieser ist wiederum ab  $d > 1$  m wie die Massenabbrandrate  $\dot{m}_f''$  nahezu konstant was zu einem konstanten Wert für  $\bar{H}_{cl}$  führt. Die berechnete, mittlere spezifische Ausstrahlung ändert sich bei dieser Variante des Zylinderflammen-Strahlungsmodells nicht. Die im Vergleich zum konventionellen Zylinderflammen-Strahlungsmodell verringerte Höhe des Zylinders hat jedoch Auswirkungen bei den weiteren Berechnungen der Bestrahlungsstärke über die Einstrahlzahl ( $\rightarrow$  Kap. 2.8.2.2), da hier die Größen der Oberfläche des strahlenden Mediums und einer Empfänger Oberfläche und ihre Orientierung zueinander berücksichtigt werden.

### 2.8.1.2 Zweizonen-Strahlungsmodell

Nach Mudan [6] setzt sich die Flammenoberfläche aus leuchtenden spots (LS) mit  $\overline{SEP}_{LS} = 140 \text{ kW/m}^2$  und schwarzen Rußzonen (SZ) mit  $\overline{SEP}_{SZ} = 20 \text{ kW/m}^2$  zusammen ( $\rightarrow$  Abb. 2.19). Die mittlere spezifische Ausstrahlung der gesamten Flamme berechnet sich dann nach

$$\overline{SEP}_{ZZS}(d) = \overline{SEP}_{LS} \bar{a}_{LS}(d) + \overline{SEP}_{SZ} \bar{a}_{SZ}(d) , \quad (2.41)$$

unter Berücksichtigung der Flächenanteile  $\bar{a}_{LS}(d) = e^{-sd}$  der leuchtenden bzw.  $\bar{a}_{SZ}(d) = (1 - e^{-sd})$  der rußenden Zonen. Der empirische Parameter erhält den Wert  $s = 0.12 \text{ m}^{-1}$ . Im Gegensatz zum modifizierten Zylinderflammen-Strahlungsmodell ist die Lage der stark emittierenden



**Abb. 2.19.** Unterteilung der Flamme nach Flächen hoher und niedriger spezifischer Ausstrahlung  $\overline{SEP}_{LS}$  und  $\overline{SEP}_{SZ}$  [74].

Flächen nicht auf den unteren Bereich der Flamme festgelegt, sondern bleibt undefiniert. Wie Abb. 2.21 zeigt, kann mit Gl. (2.41) die pooldurchmesserabhängige, mittlere spezifische Ausstrahlung bis zu  $d \approx 40$  m relativ gut beschrieben werden.

### 2.8.1.3 Organisierte Strukturen-Strahlungsmodelle OSRAMO II und OSRAMO III

Mit den Organisierte-Strukturen-Strahlungsmodellen OSRAMO II und OSRAMO III (Organized Structure Radiation Modell) von Schönbucher et al. [7,74-77] werden erstmals die auch experimentell in Poolflammen gefundenen kohärenten Strukturen berücksichtigt. Neben den bereits erwähnten Rußballen (Kap. 2.7.2) und hot spots (Kap. 2.7.3) wird weiterhin die effektive Reaktionszone im Innern der Flamme eingeführt. Die von ihr ausgehende Wärmestrahlung wird von den Rußballen und hot spots absorbiert und dann teilweise wieder emittiert. Die mittlere spezifische Ausstrahlung der gesamten Flammenoberfläche setzt sich nach OSRAMO II aus der mittleren spezifischen Ausstrahlung der Strukturelemente Rußballen und hot spot zusammen:

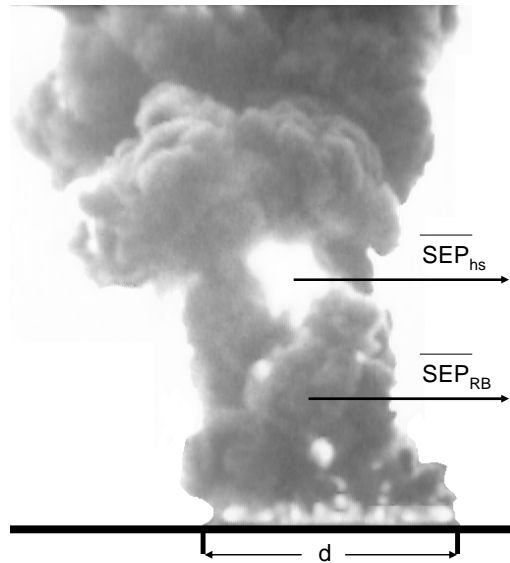
$$\overline{SEP}_{OS}(d) = \overline{SEP}_{hs} \bar{a}_{hs}(d) + \overline{SEP}_{RB} \bar{a}_{RB}(d) \quad (2.42)$$

Die durchmesserabhängigen, mittleren, spezifischen Ausstrahlungen der beiden Strukturelemente sind

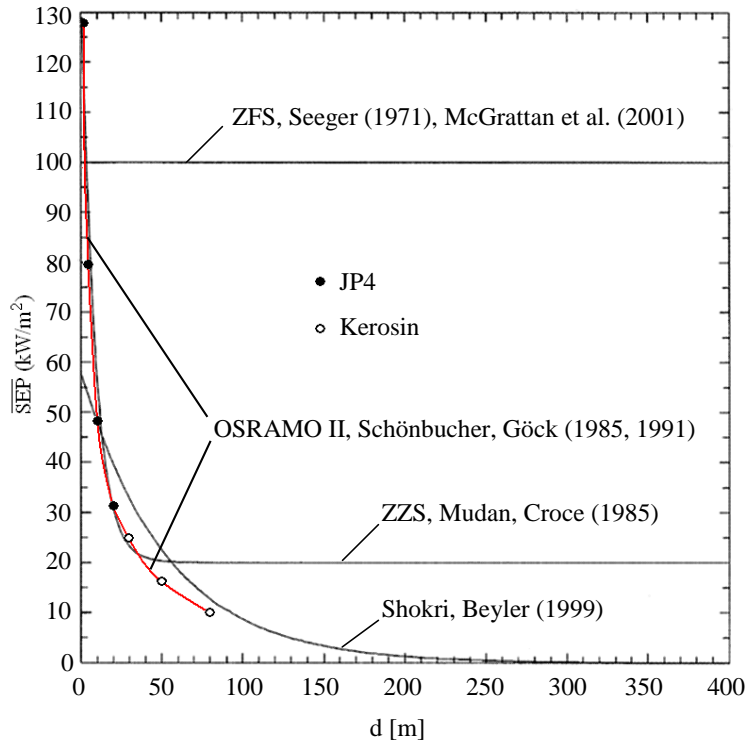
$$\overline{SEP}_{hs}(d) = \bar{\tau}_{hs} (1 - \bar{\tau}_{re}) \sigma (\bar{T}_{re}^4 - T_u^4) + (1 - \bar{\tau}_{hs}) \sigma (\bar{T}_{hs}^4 - T_u^4) \quad (2.43)$$

und

$$\overline{SEP}_{RB}(d) = \bar{\tau}_{RB} (1 - \bar{\tau}_{re}) \sigma (\bar{T}_{re}^4 - T_u^4) + (1 - \bar{\tau}_{RB}) \sigma (\bar{T}_{RB}^4 - T_u^4) \quad (2.44)$$



**Abb. 2.20.** Organisierte-Strukturen-Strahlungsmodell OSRAMO II [74]: Die mittlere spezifische Ausstrahlung  $\overline{SEP}_{OS}$  der Flamme setzt sich aus der mittleren spezifischen Ausstrahlung von Rußballen  $\overline{SEP}_{RB}$  und hot spots  $\overline{SEP}_{hs}$  zusammen.



**Abb. 2.21.** Gemessene und mit verschiedenen Modellen berechnete mittlere spezifische Ausstrahlung  $\overline{SEP}$  sowie eine empirische Korrelation von Shokri und Beyler [78].

mit den ebenfalls durchmesserabhängigen, modifizierten effektiven Durchlassgeraden der Strukturelemente  $i = \text{hs, RB}$ , re:

$$\bar{\tau}_i(d) = e^{-k_{\text{eff},i} d} \quad (2.45)$$

Für die modifizierten effektiven Absorptionskoeffizienten der Strukturelemente gilt [77]

$$\bar{k}_{\text{eff},i} = \frac{36\pi f_i(n,e) a_2}{c_2} \frac{\bar{c}_{S,i}}{\bar{\rho}_{S,i}} \bar{T}_i = 1.81 \cdot 10^3 \bar{T}_i m_i \bar{f}_V \approx 1.12 \cdot 10^{-3} \bar{T}_i m_i, \quad (2.46)$$

bei Berücksichtigung der mittleren Temperaturen  $\bar{T}_i$  sowie der Rußkonzentrationen  $c_{S,i}$  und Rußdichten  $\rho_{S,i}$  in den einzelnen Strukturelementen. Weiterhin beschreiben  $c_2$  die zweite Plancksche Konstante,  $\bar{f}_V$  den Rußvolumenanteil und die Funktion  $f_i(n,e)$  die optischen Eigenschaften der Rußteilchen [79]. Der unterschiedliche Flächenanteil  $a_{\text{hs}}$  von hot spots und  $a_{\text{RB}}$  von Rußballen in Abhängigkeit vom Pooldurchmesser wird ebenfalls berücksichtigt:

$$\bar{a}_{\text{RB}}(d) = e^{-\left(\frac{d_0}{d}\right)^{a_3}} \quad (2.47)$$

$$\bar{a}_{\text{hs}}(d) = 1 - \bar{a}_{\text{RB}}(d) \quad (2.48)$$

Die Zahlenwerte der empirischen Parameter  $d_0$ ,  $a_3$ ,  $\bar{k}_{\text{eff},i}$ ,  $\bar{T}_i$ , die durch Variation der Parameter längs Gram-Schmidt-orthogonalisierter Suchrichtungen unter Beachtung von Parameterschranken ermittelt wurden, sind in Tab. 2.4 für die Brennstoffe JP4 und LNG aufgeführt.

Mit dem Strahlungsmodell OSRAMO II lässt sich die mittlere spezifische Ausstrahlung großer Poolflammen in Abhängigkeit vom Brennstoff und Pooldurchmesser sehr gut wiedergeben. Es ist z.B. für Kerosin bzw. JP4 Poolfeuer bis  $d = 80$  m validiert und zeigt bis zu diesem Durchmesser die beste Übereinstimmung aller hier vorgestellten semi-empirischen Strahlungsmodelle ( $\rightarrow$  Abb. 2.21).

**Tab. 2.4.** Ergebnisse der Parameteranpassung für JP4 und LNG [75].

	$\bar{T}_{\text{re}}$ [K]	$\bar{T}_{\text{hs}}$ [K]	$\bar{T}_{\text{RB}}$ [K]	$k_{\text{eff, re}}$ [m <sup>-1</sup> ]	$k_{\text{eff, hs}}$ [m <sup>-1</sup> ]	$k_{\text{eff, RB}}$ [m <sup>-1</sup> ]	$d_0$ [m]	$a_3$ [-]
JP4	1413	1329	632	0.380	0.404	1.035	3.260	1.104
LNG	1597	1301	677	0.022	0.093	3.110	102.1	2.714

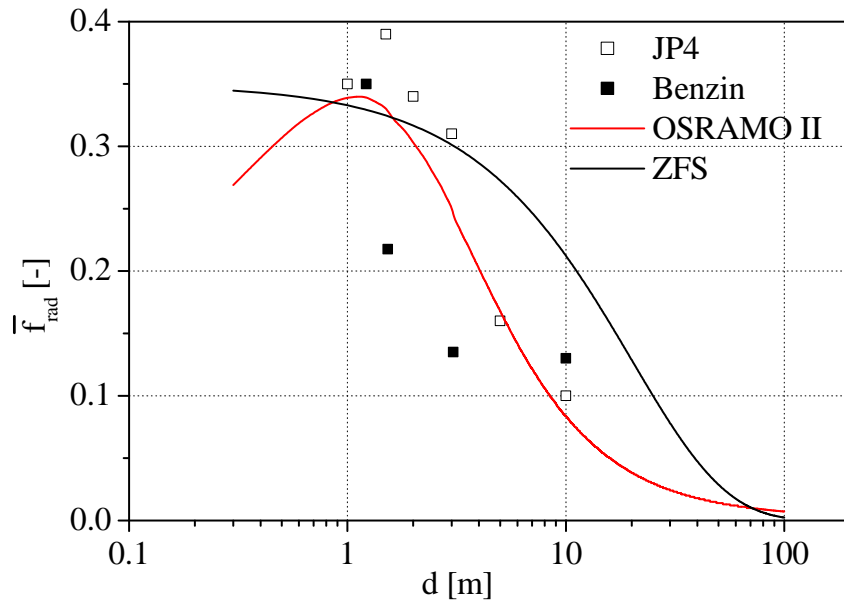
Die Abnahme der mittleren spezifischen Ausstrahlung mit zunehmendem Durchmesser legt nahe, dass sich der Anteil  $\bar{f}_{\text{rad}}$  der emittierten Strahlungsenergie  $\bar{Q}_{\text{rad}}$  an der insgesamt freigesetzten Energie  $\bar{Q}_{\text{ges}}$  ebenfalls verringert. Mit Hilfe des Strahlungsmodells OSRAMO II lässt sich  $\bar{f}_{\text{rad}}$  berechnen:

$$\bar{f}_{\text{rad}}(d) = \frac{(1 + 4\bar{H}/d)\overline{\text{SEP}}_{\text{OS}}(d)}{\frac{\bar{b}_{\text{F}}^{3/2}}{\bar{b}_{\text{F}} + g} \rho_{\text{u}} c_{\text{p,F}} T_{\text{f,Sd}} \sqrt{2a_2 d} + \bar{v}_{\text{a}} \rho_{\text{f}} [c_{\text{p,f}} (T_{\text{f,Sd}} - \bar{T}_{\text{f,u}}) + \Delta h_{\text{vap}}]} \quad (2.49)$$

Aus Gl. (2.49) ist die prinzipielle Abhängigkeit des mittleren Strahlungsanteils  $\bar{f}_{\text{rad}}$  von zahlreichen Einflussgrößen zu erkennen. Neben dem Basisdurchmesser  $d$ , der mittleren Flammengänge  $\bar{H}$  und der mittleren Abbrandgeschwindigkeit  $\bar{v}_{\text{a}}$  gehen einige thermodynamische Eigenschaften des Brennstoffes, der Flammengase und der Luft ein. Es werden die Dichten der Umgebungsluft  $\rho_{\text{u}}$  und des Brennstoffes  $\rho_{\text{f}}$  berücksichtigt, weiterhin die spezifischen Wärmekapazitäten der Flammengase  $c_{\text{p,F}}$  und des Brennstoffes  $c_{\text{p,f}}$  sowie die Siedetemperatur des Brennstoffes  $T_{\text{f,Sd}}$  sowie seine Außentemperatur  $T_{\text{f,u}}$ . Die Auftriebsbeschleunigung der Flammengase wird mit  $\bar{b}_{\text{F}} \approx 15 \text{ m/s}^2$  abgeschätzt und die Konstante mit  $a_2 = 0.5$  [77].

Experimentell lässt sich  $\bar{f}_{\text{rad}}$  nicht direkt bestimmen, es ist nur eine indirekte Abschätzung über Radiometer-Messungen möglich. Diese Abschätzungen können mit relativ hohen Ungenauigkeiten behaftet sein. Der Vergleich der Werte für JP4 [80] und Benzin [81] mit den beiden Korrelationen aus OSRAMO II und dem Zylinderflammen-Strahlungsmodell in Abb. 2.22 zeigt, dass die Werte aus den verschiedenen Methoden deutlich variieren. Die mit zunehmendem Pooldurchmesser stark abfallende mittlere spezifische Ausstrahlung ( $\rightarrow$  Abb. 2.21) spiegelt sich allerdings in der Steigung der mit OSRAMO II berechneten Kurve für  $\bar{f}_{\text{rad}}$  und in den experimentell ermittelten Werten wieder. Die Korrelation des Zylinderflammenmodells weist hingegen einen weniger steilen Abfall der Kurve auf.



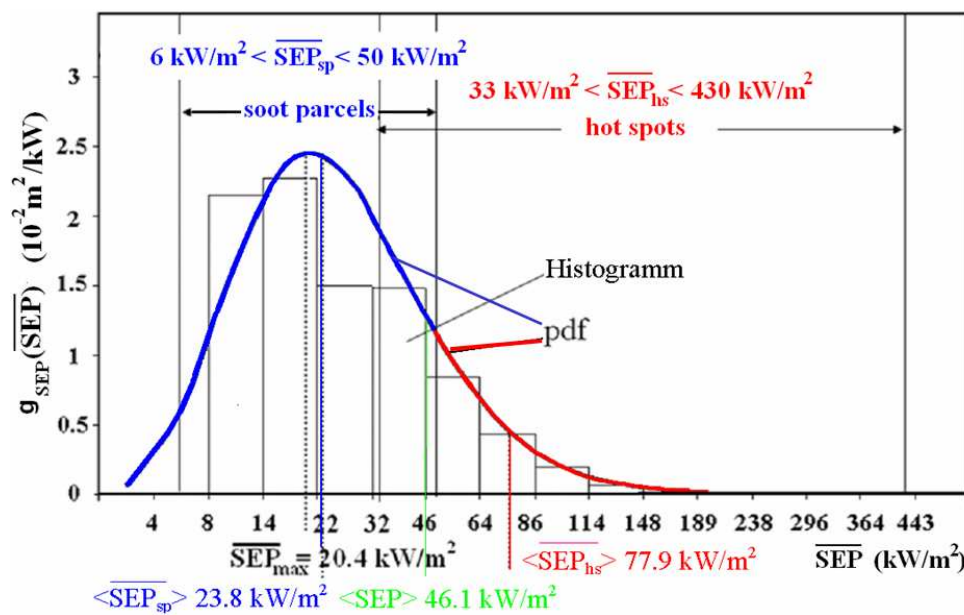


**Abb. 2.23.** Mit dem Zylinderflammen-Strahlungsmodell bzw. OSRAMO II berechnete  $\bar{f}_{\text{rad}}(d)$  und Abschätzungen für JP4 [80] und Benzin [81].

Mit dem stochastischen Strahlungsmodell OSRAMO III berechnet sich die mittlere spezifische Ausstrahlung, basierend auf den experimentellen Daten großer JP4-Poolflammen, nach [74]:

$$\overline{\text{SEP}}_{\text{OSIII}}(d, f) = \int_{\text{SEP}} g_{\text{SEP}}(\overline{\text{SEP}}, d, f) \overline{\text{SEP}} d\overline{\text{SEP}} \quad , \text{ für } d \geq 1 \text{ m} . \quad (2.50)$$

Mit OSRAMO III lassen sich aus den empirisch ermittelten logarithmisch normalen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen  $g_{\text{SEP}}(\overline{\text{SEP}}, d, f)$  ( $\rightarrow$  Abb. 2.22), den Flammentemperaturen



**Abb. 2.22.** Histogramm und logarithmisch normale Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion eines JP4-Poolfeuers ( $d = 16 \text{ m}$ ) [74].

$\bar{T}$  und der SEP die Temperaturbereiche  $\bar{T}_{hs}(d)$ ,  $\bar{T}_{RB}(d)$  sowie die Bereiche  $\overline{SEP}_{hs}(f)$  und  $\overline{SEP}_{RB}(f)$  der hot spots und Rußballen ermitteln [82,83]. Die aus OSRAMO III resultierenden Werte sind in Tab. 2.5 aufgeführt.

**Tab. 2.5.** Ergebnisse der Parameteranpassung mit OSRAMO III für JP4.

	Minimum	Maximum
$\bar{T}_{hs}(f)$	873 K	1653 K
$\bar{T}_{RB}(f)$	573 K	973 K
$\overline{SEP}_{hs}(f)$	33 kW/m <sup>2</sup>	430 kW/m <sup>2</sup>
$\overline{SEP}_{RB}(f)$	6 kW/m <sup>2</sup>	50 kW/m <sup>2</sup>

## 2.8.2 Mittlere Bestrahlungsstärke

### 2.8.2.1 Punktquellen-Strahlungsmodell

Das Punktquellen-Strahlungsmodell (PS) beschreibt die auf ein Objekt auftreffende Wärmestrahlung unter der Annahme, dass die Flamme als punktförmige Wärmequelle angesehen werden kann. Es muss weiterhin der Strahlungsanteil  $\bar{f}_{rad}$  an der insgesamt freigesetzten Energie  $\dot{Q}_{ges}$  bekannt sein und die Strahlungsintensität ist invers proportional zum Quadrat  $\Delta y^2$  der Entfernung zwischen der Flamme und dem bestrahltem Flächenlement  $A_E$ . Die mittlere Bestrahlungsstärke auf konzentrischen Kreisen mit dem Radius  $\Delta y$  ( $\rightarrow$  Abb. 2.24) ist dann [30]

$$\bar{E}_{PS} = \frac{\bar{f}_{rad} \dot{Q}_{ges}}{4a\pi\Delta y^2} = \frac{\bar{f}_{rad} \dot{m}_f'' A_P (-\Delta h_c)}{4a\pi\Delta y^2}. \quad (2.51)$$

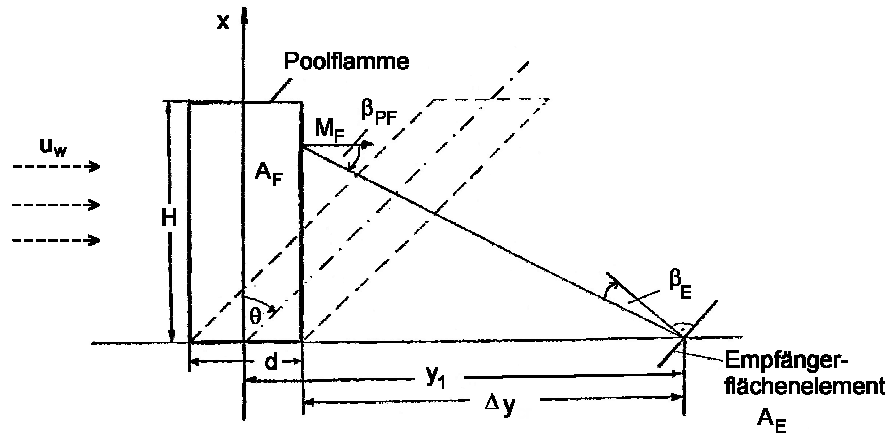
Die Pooloberfläche beträgt  $A_P = \pi r^2$ . Der empirische Faktor  $a$  wird in der Regel als 1 angenommen. Im kommerziellen Programmpaket WHAZAN findet sich jedoch eine Abwandlung des Punktquellen-Strahlungsmodells in dem der empirische Faktor als  $a = c_1 \cdot \dot{m}_f''^{0.61} + 1$  eingesetzt wird mit  $c_1 = 72 \text{ m}^{1.22} \text{ s}^{0.61} \text{ kg}^{-0.61}$ . Die Fläche wird anhand  $A_P = \pi dH + \pi r^2$  berücksichtigt [30].

Der mit dem Brennstoff und dem Pooldurchmesser variierende Strahlungsanteil  $\bar{f}_{rad}$  wird nach Moorhouse und Pritchard [84] berechnet:

$$\bar{f}_{rad} = \frac{\overline{SEP}}{\dot{m}_F'' \Delta h_c} \left( 1 + 4 \frac{\bar{H}}{d} \right). \quad (2.52)$$

Das Punktquellen-Strahlungsmodells liefert in größeren Entfernungen von der Flamme befriedigende Ergebnisse für die Bestrahlungsstärke, in kleineren Abständen ist es jedoch unbrauchbar, da es hier die Wärmestrahlung unterschätzt. Der Grund liegt in der Annahme einer punktförmigen Strahlungsquelle, denn im Nahbereich hängt die Bestrahlungsstärke stark von der Länge, Neigung und Form der Flamme ab und von ihrer Orientierung zum Strahlungsempfänger.



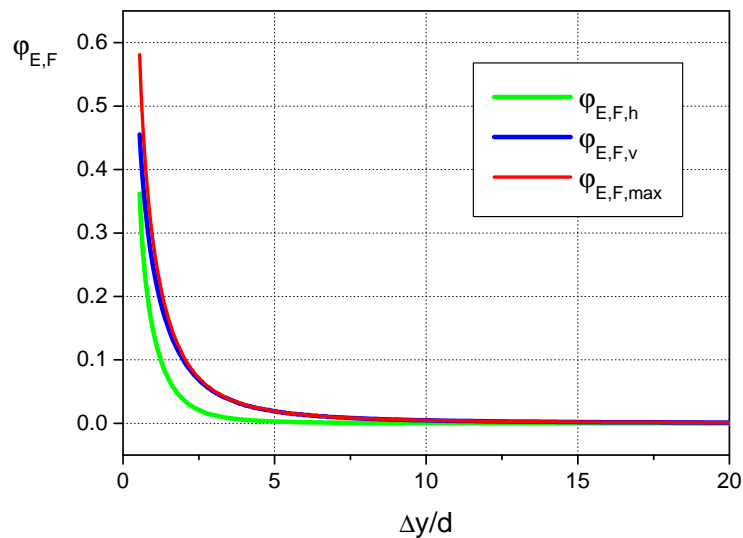


**Abb. 2.26.** Strahlungsaustausch zwischen einer zylinderförmigen Poolflamme und einem auf Bodenhöhe positioniertem Empfängerflächenelement, die eine Orientierung  $\beta_{PF}$ ,  $\beta_E$  zueinander aufweisen.

$$\varphi_{E,F,h} = \frac{1}{\pi} \left[ \arctan \sqrt{\frac{b+1}{b-1}} - \left( \frac{b^2 - 1 + a^2}{\sqrt{AB}} \right) \arctan \sqrt{\frac{(b-1)A}{(b+1)B}} \right] \quad (2.56)$$

$$\varphi_{E,F,v} = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{1}{b} \arctan \frac{a}{\sqrt{b^2 - 1}} + \frac{a(A - 2b)}{b\sqrt{AB}} \arctan \sqrt{\frac{(b-1)A}{(b+1)B}} - \frac{a}{b} \arctan \sqrt{\frac{b-1}{b+1}} \right] \quad (2.57)$$

und



**Abb. 2.25.** Horizontale, vertikale und maximale Einstrahlzahl zwischen einer zylinderförmigen Poolflamme und einem auf Bodenhöhe positioniertem Empfängerflächenelement in Abhängigkeit vom relativen Abstand  $\Delta y/d$  von der Flammenachse.

$$A = (b+1)^2 + a^2; \quad B = (b-1)^2 + a^2 \quad (2.58)$$

$$a = \frac{H}{r} = 1.5; \quad b = \frac{y_1}{d} \quad (2.59)$$

Die Gleichungen (2.55)-(2.59) gelten nur für eine ungestörte Flamme. Im Fall einer Flammenneigung um den Winkel  $\theta$ , verursacht z.B. durch die Windgeschwindigkeit  $u_w$ , ändert sich die Einstrahlzahl beträchtlich [6,30].

Abb. 2.25 zeigt Profile der horizontalen, vertikalen und maximalen Einstrahlzahlen in Abhängigkeit vom relativen Abstand  $\Delta y/d$  von der Flammenachse. Es fällt auf, dass selbst für sehr kleine relative Abstände die maximale Einstrahlzahl Werte  $\phi_{E,F,\max} \ll 1$  annimmt. Daher wird die Bestrahlungsstärke selbst bei realistischen Werten für die spezifische Ausstrahlung, wie z.B. aus dem Strahlungsmodell OSRAMO II erhalten, in unmittelbarer Nähe des Poolrandes zu niedrig abgeschätzt.

## 2.9 Klassifizierung von Flammenmodellen

Neben den im vorigen Kapitel bereits besprochenen semi-empirischen Modellen gibt es weitere Modelle zur Beschreibung physikalisch-chemischer Prozesse bzw. strömungstechnischer Problemstellungen. In den folgenden Abschnitten werden kurz die Prinzipien und gegebenenfalls die Unterschiede der verschiedenen Modelle erläutert.

### 2.9.1 Semi-empirische Modelle

In Kap. 2.8 wurden bereits die wichtigsten semi-empirischen Wärmestrahlungsmodelle für Poolflammen erläutert. Sie zeichnen sich dadurch aus, dass mit relativ wenig Aufwand der Wärmestrom von einem Feuer zu einem externen Objekt berechnet werden kann. Sie können einfach in Computer-Programme integriert werden und sind auch in kommerzieller Software erhältlich.

Semi-empirische Modelle hängen stark von den Ausgangswerten ab, die in der Berechnung vorgegeben werden. Dabei kann es sich um direkt gemessene Werte handeln, aber auch um Werte, die über die verschiedenen Korrelationen der vorangegangenen Kapitel z.B. für die Flammengometrie oder die Massenabbrandrate angenähert wurden. Treten Effekte auf, die in den Korrelationen nicht berücksichtigt wurden, wie geometrische Gegebenheiten, die z.B. die Luftansaugung oder die freie Ausbreitung der Flamme beeinträchtigen, oder besitzt der Brennstoff andere chemische oder physikalische Eigenschaften als die der Korrelation zugrunde liegenden Stoffe, so können die mit semi-empirischen Modellen berechneten Werte unter Umständen deutlich von dem Experiment bzw. tatsächlichem Brandszenario abweichen.

Die Modelle wurden entwickelt, um die zeitlich gemittelte Wärmestrahlung zu berechnen. Teilweise ist jedoch auch die Kenntnis der zeitlichen Fluktuationen von Interesse, da unter Umständen auch Strahlungsmaxima über wenige Sekunden dem Menschen schwere Verbrennungen zufügen können. Daher sind weiterführende Betrachtungen wünschenswert.

### 2.9.2 Zonenmodelle

Zonenmodelle werden häufig bei Berechnungen von Bränden innerhalb geschlossener Geometrien wie z.B. bei Gebäudebränden eingesetzt. Zonenmodelle unterteilen das Simulationsgebiet je nach Bedarf in ca. 2 bis 20 Zonen. Die Simulationen können im Gegensatz zu den semi-empirischen Modellen zeitaufgelöst erfolgen. Für jeden Zeitschritt werden die Energiebilanzgleichung und die Kontinuitätsgleichung in den Zonen gelöst.

Für die detaillierte Berechnung von Flammen und ihren komplexen physikalisch-chemischen Vorgänge sind die Zonenmodelle jedoch aufgrund ihrer geringen räumlichen Auflösung nicht geeignet. Meist wird der Brandherd selbst anhand empirischer Ergebnisse vorgegeben um eine schnelle, wenn auch eventuell relativ grobe Abschätzung der Auswirkungen eines Brandes zu berechnen. Die Berücksichtigung des Einflusses komplexer Geometrien, die z.B. die Luftzufuhr zum Brandherd oder die Schadstoffverteilung drastisch beeinflussen können, ist nur eingeschränkt möglich.

### 2.9.3 Feldmodelle

Die Feldmodelle sind grundsätzlich stationär und dienen meist zur Vorhersage nicht reagierender Strömungen. Vor der Verwendung von Feldmodellen muss die gesamte Geometrie des Simulationsgebiets zunächst detailliert im Computer mit Hilfe eines Präprozessors bzw. CAD-Programms dargestellt werden. Anschließend wird die Geometrie in eine Vielzahl von Zellen eingeteilt, deren Anzahl im Prinzip nur von der zur Verfügung stehenden Hard- und Software limitiert wird. Im Gegensatz zu den Zonenmodellen werden Gitter definiert, die Zehntausende bis mehrere Millionen Zellen enthalten können. Bei der eigentlichen Berechnung werden dann für jede einzelne Zelle die Bilanzgleichungen für z.B. Masse, Impuls und gegebenenfalls die Energie anhand partieller Differentialgleichungen unter Festlegung bestimmter Randbedingungen gelöst. Da der Einfluss der Nachbarzellen auf die Verhältnisse einer Zelle berücksichtigt werden muss, erfolgt die Lösung iterativ. Nach erfolgter Simulation liegen die Ergebnisse in Form einer Vielzahl an Größen wie z.B. Strömungsgeschwindigkeit, Temperatur und Druck für jede Zelle vor. Das Vorliegen der Daten in zwei- oder dreidimensionalen Feldern verleiht dieser Modellklasse ihren Namen.

Berechnungen mit Feldmodellen können aufgrund ihrer mathematischen Komplexität lange Rechenzeiten auf modernen Computersystemen erfordern. Durch ihre detaillierte Beschreibung der strömungsmechanischen Prozesse sind Feldmodelle aber nicht auf spezielle Problemstellungen beschränkt sondern in fast allen Bereichen der Strömungsmechanik anwendbar. Die Qualität der Ergebnisse hängt von der Güte der räumlichen Diskretisierung und der korrekten Festlegung der Start- und Randbedingungen sowie von den Submodellen ab.

### 2.9.4 Integralmodelle

Integralmodelle stellen einen Kompromiss zwischen semi-empirischen Modellen und Feldmodellen dar. Wie bei den Feldmodellen erfolgt die Lösung von Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, Energie und gegebenenfalls weitere Größen. Damit sind die Integralmodelle ebenfalls für einen größeren Bereich von Problemstellungen einsetzbar als die semi-empirischen Modelle. Im Gegensatz zu den Feldmodellen werden die partiellen Differentialgleichungen

aber integriert, daher leitet sich der Name der Modellklasse ab, und zu gewöhnlichen Differentialgleichungen reduziert. Die gesuchten Größen können dann ausgehend von einem bekannten Zustand über ein inkrementelles Berechnungsschema bestimmt werden. Daher sind auch Integralmodelle auf realistische Startwerte angewiesen. Im Bereich der Flammen kommen diese Modelle nicht zum Einsatz, zurzeit sind keine Integralmodelle zur Vorhersage der Schadenauswirkungen großer Poolfeuer bekannt [30].

### **2.9.5 CFD-Modelle**

Im Unterschied zu den Feldmodellen (→ Kap. 2.9.3) können mit CFD-Modellen auch reagierende Strömungen simuliert werden. Außerdem können auch instationäre Berechnungen erfolgen. Die Nutzung von CFD-Modellen setzt, ebenso wie bei den Feldmodellen, eine möglichst feine Diskretisierung der Geometrie voraus. Auf dem Rechengitter erfolgt dann die Lösung der Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und, wenn erforderlich, für weitere Größen wie z.B. Energie und Spezies anhand partieller Differentialgleichungen. Aus der nahen Verwandtschaft der beiden Methoden ergeben sich für die CFD-Modelle die gleichen Vor- und Nachteile wie für die Feldmodelle. Neben der Generierung eines anspruchsvollen Gitters erfordern sie vom Anwender die Kenntnis der Stärken und Schwächen der zur Verfügung stehenden Submodelle (z.B. Turbulenzmodelle) und eine realistische Abschätzung der Start- und Randbedingungen. Außerdem sind moderne Computersysteme nötig, um die Rechenzeiten in einem angemessenen Rahmen zu halten. Prinzipiell ist eine Anwendung auf nahezu alle strömungsmechanischen Problemstellungen denkbar.





## 3 Experimentelle Untersuchungen

### 3.1 Pools und Versuchsgelände

Zur Untersuchung der Dynamik großer Poolflammen und der Bestimmung verschiedener Eigenschaften wie z.B. Flammenlänge und -temperaturen und der emittierten Wärmestrahlung wurden Brandversuche an Poolflammen mit verschiedenen Brennstoffen bei Pooldurchmessern von 1 m, 8 m, 16 m und 25 m bzw. mit einem Rechteckpool mit einer Kantenlänge von 1 m durchgeführt.

Die Poolflammen mit einem Pooldurchmesser bzw. einer Kantenlänge von 1 m wurden auf einer nahezu kreisrunden Lichtung eines bewaldeten Versuchsgeländes der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM) nahe Berlin untersucht.

Der überwiegende Teil der Versuche fand auf dem in Abb. 3.1 skizzierten Versuchsgelände der Deutschen Forschungs- und Versuchsanstalt für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Trauen bei Munster statt [77]. Die kreisrunden Pools befinden sich hier in einer annähernd quadratischen

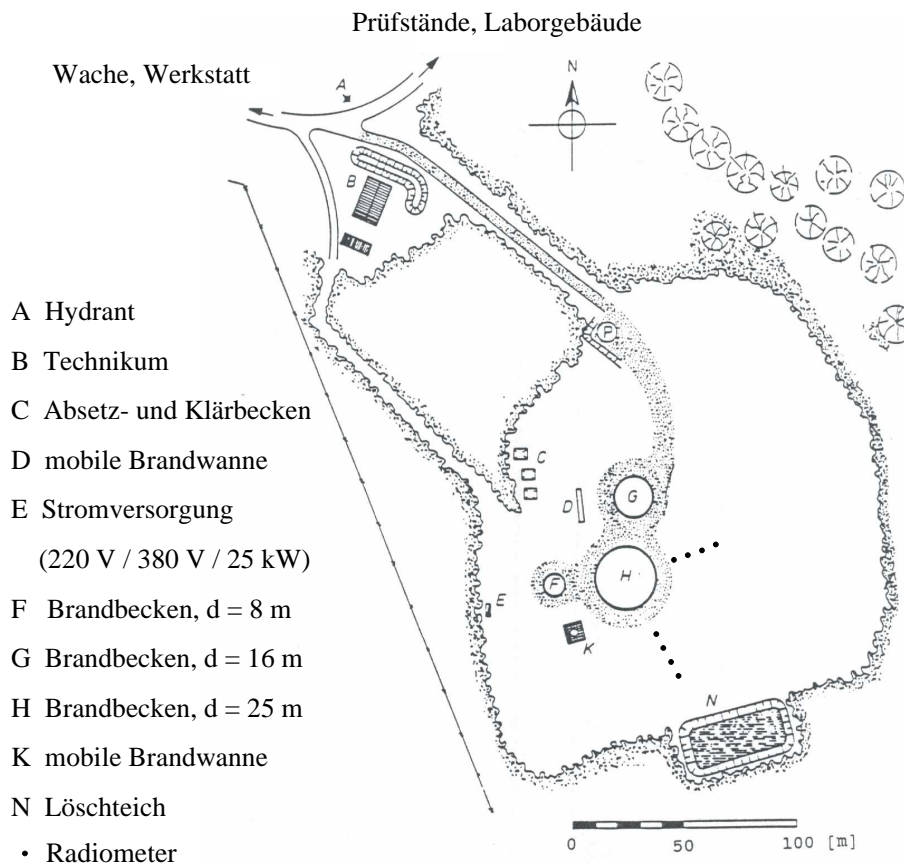
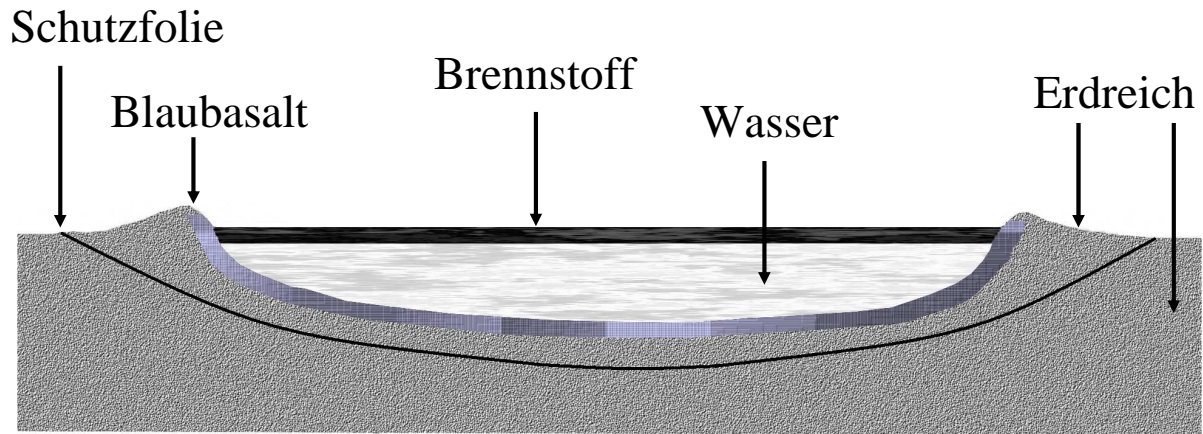


Abb. 3.1. Versuchsgelände der DLR in Trauen [86].



**Abb. 3.2.** Aufbau der Pools nach Balluff [24].

Waldlichtung mit einer Seitenlänge von ca. 150 m.

Die Pools sind aus Beton gegossen und sind mit Blaubasaltsteinen ausgelegt. Zusätzlich ist in das Erdreich unter dem Pool eine mineralölfeste Folie eingezogen, um das Versickern der Brennstoffe zu verhindern. Die Pools wurden bis etwa 10 cm unterhalb des Umgebungsniveaus mit Wasser gefüllt, dann wurde der Brennstoff darauf geschichtet (→ Abb. 3.2). Es wurden verschiedene Brennstoffe eingesetzt, die für diese Arbeit Wichtigsten waren Superbenzin, Diesel, Pentan und ein Gemisch aus 80 % JP4 (Jet-petrol 4, Flugzeugtreibstoff) und 20 % Normalbenzin.

Wie nachfolgend beschrieben erfolgte neben der Ermittlung der Flammentemperaturen über ein IR-Thermographiesystem die Bestimmung der Bestrahlungsstärke der Flammen in verschiedenen Abständen vom Pool. Weiterhin wurde der VIS-Bereich der Flammen mit einer 16 mm-Filmkamera aufgezeichnet.

### 3.2 Fotografische Aufnahmetechnik

Zur Aufzeichnung des VIS-Bereichs der Poolflammen wurde eine 16 mm-Filmkamera des Typs "Beaulieu R16" verwendet. Die Kamera besaß einen Belichtungsmesser mit Nachführeinrichtung und war mit einem 12–120 mm-Zoom-Objektiv des Typs "Angenieux" ausgestattet.

Die Kamera wurde auf einem Stativ montiert und über ein externes Batteriepack mit Strom versorgt. Von wenigen Ausnahmen abgesehen betrug die Aufnahmefrequenz 50 Bilder pro Sekunde. Zur Überprüfung der Aufnahmefrequenz wurde eine Kontrollleuchte, die in einer definierten Frequenz aufleuchtet, im Versuchsgelände aufgestellt und ebenfalls auf den Film aufgenommen.

### 3.3 Infrarot-Thermographiesystem

Zur Bestimmung der Flammentemperaturen wurde ein Infrarot-Thermographiesystem der Firma Hughes Aircraft eingesetzt. Es besteht aus einem Infrarot-Messkopf, einer Schwarzweiß-Videokamera, einem digitalen Prozessor mit Farbbildschirm sowie einer Video-Mischeinheit.

Das IR-System besitzt eine 4-Bit-Auflösung, die eine Temperatureinteilung in 16 Bereiche bei einer maximalen Empfindlichkeit von  $\Delta T = 0.1 \text{ K}$  ermöglicht. Die Bildaufnahmefrequenz des Systems beträgt 20 Bilder pro Sekunde, was einer Zeitauflösung von  $\Delta t = 0.05 \text{ s}$  entspricht. Der detektierte Wellenlängenbereich beträgt  $2 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 5.6 \mu\text{m}$ .

Die Video-Mischeinheit ermöglicht die Überlagerung und Speicherung von Mischbildern, die den infraroten Bereich und die schwarzweiße Darstellung des sichtbaren Bereichs der Flamme anzeigen. Dadurch lässt sich die ermittelte Temperaturverteilung sichtbaren Flammenstrukturen zuordnen.

Weitere Details zum IR-Thermographiesystem, das Messprinzip und die erzielten Ergebnisse werden von Göck [86] beschrieben.

### 3.4 Radiometer

Die Gesamtstrahlungsmessungen der Poolflammen erfolgten mit Ellipsoidal Radiometern der Firma Medtherm Cooperation. Bei den Geräten handelt es sich um fensterlose Infrarot-Radiometer, mit denen Messungen von Oberflächen- bzw. Flammenstrahlung durchgeführt werden können.

Der Messkopf des Radiometers besitzt eine ellipsoidische Aushöhlung in dessen vorderem Brennpunkt die Radiometeröffnung, im hinteren Brennpunkt eine sensitive Thermosäule angebracht ist ( $\rightarrow$  Abb. 3.3). Durch diesen Aufbau besitzt das Radiometer einen Öffnungswinkel von fast  $180^\circ$ , der Raumwinkel beträgt also  $\Omega \approx 2\pi \text{ sr}$ . Der registrierte Wellenlängenbereich des Radiometers beträgt  $0.6 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 15.0 \mu\text{m}$  bei einer Absorptionsempfindlichkeit von 92 %.

Die Anordnung der Radiometer erfolgte entsprechend Abb. 3.1 in einem relativen Abstand  $0.0 \leq \Delta y/d \leq 1.7$  vom Poolrand der verschiedenen Flammen.

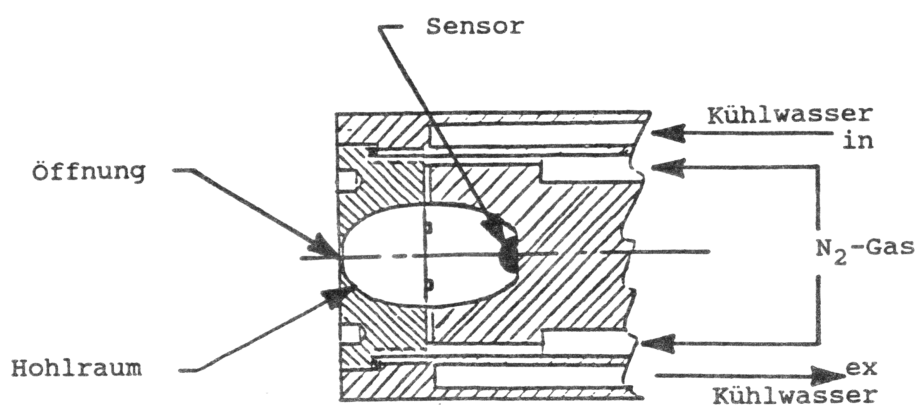


Abb. 3.3: Aufbau des Ellipsoidal Radiometers [86].

### **3.5 Windmessstation**

Zur Registrierung der Windverhältnisse wurde ein 10 m hoher Kurbelmast verwendet, an dem in 2 m, 6 m und 10 m Höhe Messwertaufnehmer montiert waren. Die Messstation zeichnete im Abstand von 3 s die Windgeschwindigkeit und die Windrichtung auf.

## 4 Darstellung und Diskussion des CFD-Codes CFX

### 4.1 Einführung in die Modellbildung

Unter einer mathematischen Modellierung wird die Abbildung der infolge physikalischer und chemischer Prozesse hervorgerufenen Zustände oder Zustandsänderungen eines Systems mit Hilfe von mathematischen Beziehungen verstanden. Oftmals können diese Gleichungen aufgrund ihrer Komplexität nicht mehr analytisch gelöst werden, so dass numerische Lösungsmethoden erforderlich sind. Dazu wird zunächst das Bilanzgebiet räumlich diskretisiert, d.h. durch Gitterstrukturen in finite Elemente bzw. Volumina unterteilt. Die Lösung der Bilanzgleichungen erfolgt dann an den so erzeugten diskreten Stützstellen mit Hilfe arithmetischer Operationen. Dabei haben sich iterative Methoden bewährt, bei denen die Lösung schrittweise angenähert wird. Die einzelnen Rechenschritte werden wiederholt durchgeführt, wobei die Ergebnisse eines Durchlaufs als Ausgangswerte für den Nächsten eingesetzt werden. Diese Vorgehensweise erfordert definierte Startwerte für den ersten Schritt und auch die Festlegung der Randbedingungen für die Grenzen des Bilanzgebietes.

Die exakte Lösung der Bilanzgleichungen erfordert die Auflösung der kleinsten auftretenden Längen- und Zeitskalen. Die kleinsten Wirbel sind nach Kolmogorov [87] proportional zu  $v^{3/4}$ . Bei typischen Größenordnungen für die kinematische Viskosität von  $\nu \approx 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$  lässt sich leicht errechnen, dass für exakte dreidimensionale Berechnungen oft mehr als  $10^{13}$  Gitterpunkte nötig sind [88,89]. Soll die Simulation nun transient, also zeitabhängig, erfolgen, werden teilweise weit mehr als  $10^4$  Zeit- bzw. Rechenschritte pro Gitterpunkt benötigt. Diese Anforderungen an den Speicherplatz und die Rechenleistung werden selbst moderne Parallelrechner der näheren Zukunft nicht erfüllen können.

Da also direkte numerische Simulationen für die meisten technisch relevanten Systeme zurzeit nicht durchführbar sind, ist die Einführung vereinfachender Modelle notwendig. Die darin enthaltenen Vereinfachungen sollen eine möglichst gute Beschreibung bestimmter physikalischer oder chemischer Prozesse ohne deren direkte Berechnung ermöglichen und somit den Rechenaufwand verringern. Es sind inzwischen Modelle unterschiedlichster Komplexität und Genauigkeit für die meisten wichtigen Teilprobleme wie z.B. die Behandlung von Turbulenz, Wärmestrahlung und Rußbildung entwickelt worden.

Numerische Simulationen sind oft eine ideale Ergänzung zu den Experimenten, da sie Möglichkeiten bieten, die im Experiment gar nicht oder nur schwer zu erzielen sind. In der Regel sind Aussagen über sämtliche zu berechnenden Größen wie z.B. Strömungsgeschwindigkeiten, Temperaturen oder Konzentrationen aller beteiligten Spezies im gesamten Bilanzgebiet möglich. In Experimenten können im Gegensatz dazu viele Größen oftmals nur punktuell gemessen werden, teilweise gibt es Bereiche in denen z.B. aus geometrischen oder aus sicherheitstechnischen Gründen gar keine Messungen möglich sind. Weiterhin besteht die Option, Modellierungen mit veränderten Randbedingungen oder Geometrien im Prinzip beliebig oft zu variieren. Durch die Simulationen mit Parameter- bzw. Geometrievariationen lässt sich

beispielsweise die Anzahl aufwendiger Experimente reduzieren, da bereits im Vorfeld die Nachteile bestimmter Geometrien oder auch anderer Parameter erkannt werden können.

Zur Validierung der Simulationsergebnisse sind Experimente allerdings unverzichtbar. Grundsätzlich sollten die Unterschiede der in Experiment und Simulation ermittelten Werte möglichst gering sein. Größere Differenzen zwischen experimentellen und simulierten Werten können verschiedene Ursachen haben und sollten daher stets genau untersucht werden.

Mögliche Fehlerquellen der Simulation liegen zunächst natürlich im Lösungsalgorithmus, in der Programmierung oder auch bei der Definition der Randbedingungen der Simulation. Aber selbst wenn diese ausgeschlossen werden können, beinhalten numerische Lösungen stets drei systematische Fehler, sie sind daher im mathematischen Sinne nur angenäherte Lösungen [14]:

- *Modellfehler*, definiert als die Differenz zwischen dem aktuellen Strömungsfeld und der exakten Lösung des mathematischen Modells;
- *Diskretisierungsfehler*, definiert als die Differenz zwischen der exakten Lösung der Erhaltungsgleichungen und der exakten Lösung des algebraischen Gleichungssystems;
- *Konvergenzfehler*, definiert als die Differenz zwischen der iterativen und der exakten Lösung des algebraischen Gleichungssystems.

Neben den Simulationen sind auch die Messungen fehlerbehaftet, selbst wenn der Fehler oft sehr klein ist. Hinzu kommt, dass oftmals eine physikalische Größe nicht direkt gemessen werden kann, sondern indirekt über mehrere Schritte bestimmt werden muss. Es werden dann beispielsweise eine oder mehrere Größen direkt gemessen und die gesuchte Größe wird daraus berechnet. In einem solchen Fall müssen die Ungenauigkeiten jedes Schrittes und ihr Einfluss auf die resultierende Größe abgeschätzt werden. In einer Studie über die Unsicherheiten bei der Bestimmung der Wärmestrahlung eines Feuers in einem geschlossenem Raum stellen beispielsweise Bryant et al. [90] Unsicherheiten von 7 % bis teilweise über 40 % in Abhängigkeit von den Versuchsbedingungen fest. Da die Unsicherheiten der Messergebnisse jedoch nicht immer angegeben werden, erschwert dies oftmals einen Vergleich von Experiment und Simulation.

Zum Vergleich der Ergebnisse müssen die in der Simulation berechneten Größen weiterhin sinnvoll ausgewertet bzw. visualisiert werden können. Die Grundlage für möglichst exakte Ergebnisse sind allerdings ein geeignetes Gitter und ein exakter und stabiler Löser. Es stehen inzwischen für die einzelnen Schritte der Simulation, wie z.B. das Gittergenerieren vor, die Konvergenzüberprüfung während und die Auswertung nach den Berechnungen, eine Vielzahl an Werkzeugen wie z.B. CFX, Fluent oder StarCD zur Verfügung. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Programmpaket CFX der Firma Ansys und deren Gittergenerierer ICFM CFD eingesetzt.

Die Programme basieren auf einer eulerschen Betrachtungsweise des Fluids. Das bedeutet, dass die makroskopische Änderung der Zustandsgrößen an einem festen Ort bzw. in einem ortsfesten Kontrollvolumen registriert wird [91]. Im Gegensatz dazu wird in der mikroskopischen Lagrange-Darstellung die Bewegung eines Partikels durch ein System verfolgt. Grundsätzlich ist eine Kombination der beiden Methoden möglich, wie z.B. bei der Simulation der Verbrennung von Kohlepartikeln in Brennern bzw. Feuerräumen. Hier werden einzelne Koh-

lepartikel mit der Lagrange-Methode verfolgt, wohingegen die Flammengase mit der Euler Methode beschrieben werden.

In allen durch die Diskretisierung erzeugten Kontrollvolumina müssen jeweils definierte Rechenschritte durchgeführt werden, um dort die einzelnen Bilanzgrößen zu ermitteln. Die Annahmen bzw. Vereinfachungen der einzelnen Modelle und die daraus resultierenden Rechenschritte werden in den nachfolgenden Kapiteln erläutert.

## 4.2 Differentielle Bilanzgleichungen und Zustandsgleichung

### 4.2.1 Allgemeine Formulierung der differentiellen Bilanzgleichung

Die mathematische Modellierung von Transportprozessen erfolgt anhand von Bilanzgleichungen. Die Grundüberlegung ist, dass die Speicherung einer Bilanzgröße in einem Kontrollvolumen gleich der Summe der Ströme aus bzw. in das Volumen über die Volumenoberfläche sein muss. Hierbei müssen sowohl die konvektiven als auch die diffusiven Flüsse erfasst werden.

Die Änderung der Dichtefunktion einer allgemeinen Zustandsgröße  $\phi$  kann in eulerschen Koordinaten folgendermaßen beschrieben werden:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} = -\nabla \rho u \phi + \nabla (D_\phi \nabla \phi) + S_\phi \quad (4.1)$$

Das Symbol  $\nabla$  steht für den Nabla-Operator, der in dieser Arbeit die partiellen Differentialgleichungen in den drei Raumrichtungen angibt:

$$\nabla = \left[ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right]. \quad (4.2)$$

Nach Gleichung (4.1) ist die zeitliche Änderung der Größe  $\phi$  durch den konvektiven (Term 1) und diffusiven (Term 2) Transport mit dem allgemeinen Austauschkoefizienten  $D_\phi$  bestimmt, sowie durch lokale Quellen bzw. Senken  $S_\phi$ . Die Art der Quellen kann völlig unterschiedlich sein und hängt von der bilanzierten Größe ab. Quellterme können zeitlich und räumlich variabel sein und von einer oder auch mehreren anderen Bilanzgrößen abhängig sein. In Speziesbilanzen ( $\rightarrow$  Kap. 4.2.5) treten z.B. Quellterme auf, die die Änderung des Speziesmassenanteils in Folge von chemischen Reaktionen beschreiben.

Die für die Simulation von Poolflammen benötigten Bilanzgleichungen eines reaktiven Gas/Ruß-Gemisches im Schwerfeld erhält man durch Substitution der Variablen  $\phi$  durch die folgenden Zustandsgrößen:

- Masse,  $\phi = 1$   $\Rightarrow$  Kontinuitätsgleichung
- Geschwindigkeit,  $\phi = u$   $\Rightarrow$  Impulsbilanzgleichung
- Energie,  $\phi = E$   $\Rightarrow$  Energiebilanzgleichung
- Spezies,  $\phi = n_i$   $\Rightarrow$  Speziesbilanzgleichungen

Die Bilanzgleichungen und verschiedene Möglichkeiten ihrer Berechnung werden im Folgenden dargestellt.

### 4.2.2 Massenbilanz

Ein wesentlicher Bestandteil eines Systems stellt die Masse dar. Die Gesamtmasse besitzt keine Quellen im Inneren eines finiten Volumens und erfährt im Gegensatz zu den Spezies keinen molekularen Transport. Für die Erhaltung der Massendichte mit der Gesamtdichte  $\rho$  gilt [92]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\rho u). \quad (4.3)$$

Gl. (4.3) wird auch als Kontinuitätsgleichung bezeichnet und gilt für kompressible Fluide. Im Spezialfall inkompressibler bzw. dichtebeständiger Fluide vereinfacht sich die Kontinuitätsgleichung zu:

$$-\nabla u = 0. \quad (4.4)$$

### 4.2.3 Impulsbilanz

Die Beschreibung der Impulse in einem System erfordert die Berücksichtigung aller dort wirkenden Kräfte, d.h. die Wechselwirkung jedes Fluids mit ruhenden oder auch bewegten Körpern, die Wechselwirkung verschiedener Fluide untereinander sowie den Impulsaustausch der einzelnen Teilchen eines Fluids untereinander [93]:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = -\nabla(\rho u u) - \nabla p - \nabla \tau + S_u \quad (4.5)$$

Newton fand bereits 1678, dass zur Beschreibung der Kräfte zwischen Teilen eines Fluids die dynamische Viskosität  $\mu$  als Stoffeigenschaft benötigt wird:

$$F = \mu A \frac{\partial u}{\partial y}. \quad (4.6)$$

Hier steht  $A$  für die Berührungsfläche zweier Schichten eines Fluids und der Gradient  $\partial u / \partial y$  für den Geschwindigkeitsunterschied der Schichten. In vielen Fluiden hängt  $\mu$  von der Temperatur, nicht aber vom Druck ab. Zu diesen sogenannten newtonschen Fluiden gehören z.B. Gase, Wasser oder auch Quecksilber. Beispiele für nicht-newtonsche Fluide sind Polymer-Lösungen und Blut. In newtonschen Fluiden können die Schubspannungen  $\tau$  nach dem Newtonschen Schubspannungsansatz berechnet werden [93]:

$$\tau = \mu \left( \nabla u + (\nabla u)^T \right) + \left( k_d - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla u) \delta. \quad (4.7)$$

Ein hochgestelltes  $T$  am Term  $(\nabla u)$  bedeutet, dass er zu transponieren ist, das Kronecker Delta  $\delta$ , steht für den Einheitstensor. Die Dilatations- bzw. Volumenviskosität  $k_d$  ist für einatomige Gase gleich Null und wird auch für kleine mehratomige Gase als Null abgeschätzt [93]. Daher wird sie im Folgenden nicht weiter berücksichtigt. Zur Schließung des Gleichungssystems ist die Kenntnis der Viskosität, der Gravitationskonstante und des Druckes notwendig.



Während die beiden ersten Größen bekannt sind bzw. abhängig von den Spezies und der Temperatur berechnet werden können, ist der Druck ein Teil der zu berechnenden Lösung. Die Software CFX besitzt einen gekoppelten Löser, der alle Bilanzgrößen über eine Matrix gleichzeitig berechnet ( $\rightarrow$  Kap. 4.4.2), so dass die Lösung des Gleichungssystems keinen weiteren Aufwand erfordert. Dies stellt einen Vorteil gegenüber den sogenannten iterativen Solvern dar, in denen die einzelnen Bilanzgleichungen nacheinander gelöst werden. Bei deren Vorgehensweise ist der Druck während der Lösung der Impulsgleichung noch unbekannt und muss dann auf anderem Wege bestimmt werden. Er kann beispielsweise über eine Poisson-Differentialgleichung [94] exakt, aber numerisch sehr aufwendig bestimmt werden. Häufiger kommen jedoch Druckkorrekturgleichungen zum Einsatz, bei denen der Druck ausgehend von einer ersten Druckschätzung iterativ ermittelt wird.

Die hier modellierten Poolflammen sind aufgrund ihres sehr geringen Anfangsimpulses und der sehr hohen Temperaturgradienten auftriebsbestimmte Flammen. Daher muss ein Quellterm für die Auftriebskräfte eingebunden werden:

$$S_u = (\rho - \rho_{\text{ref}})g. \quad (4.8)$$

Die Gravitationskräfte in der Impulsbilanzgleichung werden oftmals mit einem Boussinesq-Modell [95] angenähert

$$\rho - \rho_{\text{ref}} = -\rho_{\text{ref}} \beta (T - T_{\text{ref}}). \quad (4.9)$$

Hier bezeichnen  $T_{\text{ref}}$  die Referenztemperatur und  $\beta$  den thermischen Ausdehnungskoeffizienten, der sich folgendermaßen berechnet:

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \quad (4.10)$$

Dieser Ansatz wird in CFX jedoch nur bei Einkomponentensystemen angewandt. In Systemen mit mehr als einer Spezies wird die Differenz  $\rho - \rho_{\text{ref}}$  direkt berechnet. Ein geeigneter Referenzdruck für das betrachtete System, z.B. der Luftdruck in Standardatmosphäre, muss vom Anwender definiert werden. In den nachfolgenden Gleichungen wird zur kürzeren Darstellung der Quellterm  $S_u$  als  $\rho g$  angegeben, in den Simulationen wird er jedoch stets nach Gl. (4.8) berechnet.

Im Spezialfall inkompressibler Fluide mit konstanter Viskosität vereinfacht sich Gl. (4.5) zu [93]:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\rho \mathbf{u} \nabla \mathbf{u} + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \nabla p + \rho \mathbf{g} \quad (4.11)$$

Die Gleichungen (4.4) und (4.11) werden zusammen als Navier-Stokes-Gleichungen bezeichnet, benannt nach dem Franzosen Claude Louis Marie Henri Navier und dem Briten George Gabriel Stokes. Beide formulierten unabhängig voneinander in der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts diese Gleichungen zur Beschreibung der Strömung eines inkompressiblen Fluids konstanter Viskosität.

#### 4.2.4 Energiebilanz

Bei der Bilanzierung der Energie eines Systems müssen prinzipiell sämtliche auftretenden Energieformen und deren Umwandlungen ineinander berücksichtigt werden. Die einzelnen Energieformen können jedoch in verschiedenen Systemen einen unterschiedlichen Stellenwert einnehmen. Während beispielsweise in Festkörpern die Wärmeleitung als einziger Wärmetransport fungiert, ist in strömenden Fluiden mit relativ geringer Temperatur der Wärmetransport durch Konvektion der dominierende Prozess. Die Wärmeleitung ist hier in der Regel vergleichsweise gering. In reaktiven Strömungen wie den in dieser Arbeit behandelten Poolflammen sind neben der Konvektion vor allem die Energiequellterme bedingt durch die chemischen Reaktionen und der Energietransport infolge der Wärmestrahlung die entscheidenden Größen.

Die Energiebilanzgleichung ist in CFX in folgender Form enthalten [95]:

$$\frac{\partial \rho h_{\text{tot}}}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla(\rho \mathbf{u} h_{\text{tot}}) + \nabla(\lambda \nabla T) + \nabla\left(\mu \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} \nabla \mathbf{u} \delta \mathbf{u}\right) + S_h \quad (4.12)$$

(a)            (b)            (c)                            (d)                            (e)

Die spezifische Gesamtenthalpie besteht aus der statischen und der kinetischen Enthalpie:

$$h_{\text{tot}} = h_{\text{stat}} + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 \quad (4.13)$$

Die spezifische statische (thermodynamische) Energie setzt sich wiederum aus der inneren Energie  $U$  und des Zustandes des Fluids zusammen:

$$h_{\text{stat}} = U + \frac{p_{\text{stat}}}{\rho_{\text{stat}}} \quad (4.14)$$

Die zeitliche Änderung der Energie ist nach Gl. (4.12) bedingt durch die Arbeit der Druckkräfte (a), den konvektiven Transport (b), die Wärmeleitung (c) und die viskose Arbeit (d). Außerdem können über die Quellterme (e) z.B. chemische Reaktionen oder auch die Strahlung berücksichtigt werden..

Für die Energiebilanz gilt der Energieerhaltungssatz, die Gesamtenergie muss also quellfrei sein. Somit beschreiben die Quellterme lediglich die Umwandlung einzelner Energieformen ineinander, wie z.B. die Änderung der inneren Energie durch die Reaktionswärme chemischer Prozesse oder die Umwandlung von potentieller in kinetische Energie durch Arbeit. Zu ihrer Berechnung stehen Submodelle zu Verfügung, die in den Kapiteln 4.3.2 und 4.3.4 beschrieben werden.

#### 4.2.5 Speziesbilanzen

In Mehrstoffsystemen ist neben der Kontinuitätsgleichung zur Berechnung der globalen Massenbilanz eine Bilanzierung der einzelnen Spezies erforderlich. Als Bilanzgröße kann die Stoffmenge oder die Masse der jeweiligen Spezies gewählt werden, als Bezugsgröße das Vo-

lumen oder die Summe aller Speziesmassen. Wird, wie in der Software CFX, der Massenbruch  $Y_i = \rho_i/\rho$  bilanziert, ergibt sich folgende Gleichung:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = -\nabla \rho Y_i u + \nabla (D_i \nabla \rho Y_i) + S_i. \quad (4.15)$$

Das Aufstellen einer Beziehung entsprechend Gl. (4.15) für alle Spezies  $i$  und anschließende Summation ergibt folgerichtig die globale Massenbilanzgleichung ( $\rightarrow$  Gl. (4.3)), da sich die Quellterme der chemischen Reaktionen und die Diffusionsterme zu null summieren.

Da sich alle Massenbrüche  $Y_i$  zu eins summieren und die globale Massenbilanz ohnehin gelöst wird, muss die Bilanzgleichung (4.15) nur für  $i-1$  Spezies gelöst werden. Der Massenanteil einer Spezies kann dann einfach durch Differenzbildung bestimmt werden. Ist die Gesamtzahl von Bilanzgleichungen relativ klein, führt das Ersetzen einer partiellen Differentialgleichung durch eine algebraische Beziehung zu einer deutlichen Verringerung der Rechenzeit.

#### 4.2.6 Zustandsgleichung

Das obige Gleichungssystem kann geschlossen werden, indem eine algebraische Gleichung zur Berechnung der Dichte eingeführt wird. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Zustandsgleichung der idealen Gase verwendet, um einen Zusammenhang zwischen der Dichte mit dem Druck und der Temperatur herzustellen [95]:

$$\rho = \frac{M(p + p_{\text{ref}})}{R T} \quad (4.16)$$

Hier bezeichnen  $M$  die molare Masse des Gases und  $R$  die allgemeine Gaskonstante. In CFX wird ein Referenzdruck  $p_{\text{ref}}$  definiert, auf den alle berechneten Drücke  $p$  bezogen werden. Durch das Rechnen mit den relativen Werten werden Rundungsfehler vermieden. Diese könnten bei sehr kleinen Dichteänderungen im Vergleich zum absoluten Druck auftreten.

### 4.3 Submodelle

#### 4.3.1 Turbulenzmodelle

##### 4.3.1.1 Eigenschaften turbulenter Strömungen

Prinzipiell können Strömungen in laminar oder turbulent unterteilt werden, wobei ein fließender Übergang zwischen beiden Zuständen besteht. Laminare Strömungen zeichnen sich durch parallele Stromlinien in der Hauptstromrichtung aus. Störungen werden relativ schnell wieder ausgeglichen und die ursprünglichen Strömungszustände wiederhergestellt. Im Gegensatz dazu treten in turbulenten Strömungen Wirbel auf, die durch Störungen wie z.B. Scherkräfte zwischen Wänden und Fluid oder Impulsaustausch zwischen Fluidschichten mit sehr unterschiedlichen Geschwindigkeiten verursacht werden. Die Wirbel bewirken einen verstärkten Transport aller Bilanzgrößen quer zur bzw. entgegen der Hauptstromrichtung. Das Strömungsbild wird durch die Wirbelbildung unregelmäßig, chaotisch und schwer vorhersagbar.

Der Umschlag einer laminaren Strömung in eine Turbulente erfolgt bei einer charakteristischen Reynoldszahl

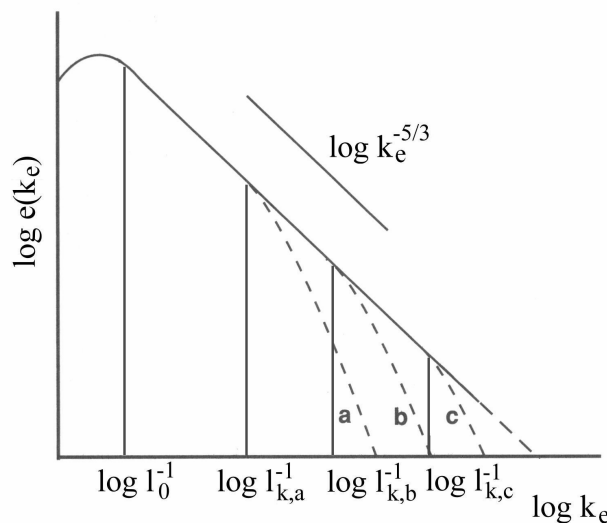
$$\text{Re} = \frac{\rho u l}{\mu} = \frac{u l}{\nu} \quad (4.17)$$

mit der Dichte  $\rho$  und der dynamischen Viskosität  $\mu$  bzw. der kinematischen Viskosität  $\nu$ . Weiterhin muss eine für das System charakteristische Geschwindigkeit  $u$  und eine charakteristische Länge  $l$  gewählt werden. So wird  $l$  beispielsweise in Rohrströmungen in der Regel gleich dem Rohrdurchmesser gewählt, der Umschlagspunkt von laminarer zu turbulenter Strömung liegt dann bei  $\text{Re} \approx 2000$ .

In turbulenten Strömungen erfolgt durch Impuls- und Energieaustausch zwischen den Wirbeln ein stetiger Zerfall größerer Wirbel in Kleinere. Dabei wird die Turbulenzenergie in innere bzw. thermische Energie umgewandelt. Die größten Längenskalen entsprechen hierbei den geometrischen Abmessungen des Systems, dem sogenannten integralen Längenmaß  $l_0$ . Durch den stetigen Zerfall entsteht eine Energiekaskade, die beim kleinsten Längenmaß, dem Kolmogorov-Längenmaß  $l_k$ , endet. Beim Kolmogorov-Längenmaß ist die kinetische Energie kleiner Wirbel soweit dissipiert, dass die halbe Umdrehungszeit eines Wirbels gleich der Zeit für die Diffusion über den Durchmesser  $l_k$  ist. Somit ist unter  $l_k$  die Diffusion schneller als der turbulente Transport und es können keine turbulenten Prozesse mehr festgestellt werden.

Die Verteilung der turbulenten kinetischen Energie auf die verschiedenen Längenskalen kann anhand der spektralen Energiedichte  $e(k_e)$  verdeutlicht werden. Sie ist u. a. abhängig von der Wellenzahl  $k_e$ , die gleich dem Reziprokwert des turbulenten Längenmaßes  $l$  ist. Sie ist mit der mittleren spezifischen turbulenten kinetischen Energie pro Masseinheit  $q$  folgendermaßen verknüpft [96]:

$$q(\vec{r}, t) = \int_0^{\infty} e(k_e, \vec{r}, t) dk_e. \quad (4.18)$$



**Abb. 4.1.** Turbulentes Energiespektrum:  $l_0$  symbolisiert das integrale Längenmaß,  $l_{k,a}$ ,  $l_{k,b}$ ,  $l_{k,c}$  sind die Kolmogorov-Längenmaße für die drei Reynoldszahlen  $a = \text{Re}_1 < b = \text{Re}_2 < c = \text{Re}_3$  [89].

Die logarithmische Auftragung in Abb. 4.1 zeigt, dass in einer dreidimensionalen Strömung die spektrale Energiedichte bei kleineren Längenskalen proportional zu  $k_e^{-5/3}$  abnimmt. Das bedeutet, dass der größte Teil der turbulenten kinetischen Energie in den großen Wirbeln lokalisiert ist. Der Einfluss der Reynoldszahl auf die spektrale Energiedichte ist anhand der drei Kurven a, b und c verdeutlicht. Mit zunehmender Reynoldszahl von Kurve a zu Kurve c verschiebt sich das Kolmogorov-Längenmaß zu kleineren Wellenlängen, d.h. die Turbulenz dominiert dann auch bei zunehmend kleineren Wirbeln den Transport.

Zur Beschreibung des Turbulenzgrades kann anstelle der geometrieabhängigen Reynoldszahl die Turbulenz-Reynoldszahl verwendet werden [92]:

$$R_l = \frac{\bar{\rho} \sqrt{2q} l_0}{\bar{\mu}}. \quad (4.19)$$

Die Kolmogorov-Länge kann nun aus der Turbulenz-Reynoldszahl berechnet werden [92,96]:

$$l_k = \frac{l_0}{R_l^{3/4}}. \quad (4.20)$$

Wegen der ständigen Umwandlung der kinetischen Energie in innere bzw. thermische Energie benötigen turbulente Strömungen eine permanente Energiezufuhr zu ihrer Aufrechterhaltung. Diese kann beispielsweise durch eine beständige Anströmung aufgrund von Gravitationskräften in der Natur oder in Rohrleitungen durch Pumpen bewirkt werden.

Die räumliche Diskretisierung im Maßstab der sehr kleinen Längenskalen der kleinsten Wirbel und somit die direkte numerische Berechnung in praxisnahen Anwendungen ist mit der heutigen Computertechnologie nicht möglich ( $\rightarrow$  Kap. 4.1). Daher muss die Turbulenz ohne deren exakte Auflösung unter Verwendung bestimmter Annahmen beschrieben werden. Einige der am häufigsten verwendeten Modelle zur Turbulenzmodellierung sollen im Folgenden beschrieben werden.

#### 4.3.1.2 Reynolds-gemittelte Modelle

Betrachtet man den zeitlichen Verlauf einer Größe  $\phi$  so fällt auf, dass der Wert zwar deutlichen Schwankungen unterliegt, im zeitlichen Mittel oft aber konstant bleibt ( $\rightarrow$  Abb. 4.2a). Der Ansatz der Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Modelle (Reynolds Averaged Navier-Stokes - RANS) basiert nun darauf, die Bilanzgröße  $\phi$  in einen zeitlichen Mittelwert und eine Schwankungsgröße aufzuteilen:

$$\phi(x, y, z, t) = \bar{\phi}(x, y, z, t) + \phi'(x, y, z, t) \quad (4.21)$$

Der Mittelwert für den statistisch stationären Fall ( $\rightarrow$  Abb. 4.2a) berechnet sich dann nach [14]

$$\bar{\phi}(x, y, z, t) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \phi(x, y, z, t) dt. \quad (4.22)$$

Das Mittelungsintervall  $\tau$  muss dabei im Vergleich zur typischen Zeitskala der Schwankung sehr groß sein. Nur dann ist gewährleistet, dass  $\bar{\phi}$  nicht von der Wahl des Startpunktes der Mittelung abhängig ist.

Die Betrachtung von Abb. 4.2b macht schnell klar, dass Gl. (4.22) nicht für einen statistisch instationären Prozess herangezogen werden kann. In diesem Fall kann eine Ensemble-Mittelung erfolgen [14]:

$$\bar{\phi}(x, y, z, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \phi(x, y, z, t) \quad (4.23)$$

mit der Anzahl  $N$  der Elemente eines Ensembles, die groß genug sein muss, um die Fluktuationen herauszumitteln, aber klein gegenüber der makroskopischen Änderung der Größe  $\phi$ .

In Verbrennungsprozessen treten in der Regel große Dichteschwankungen auf. In deren Berechnung hat sich als Mittelwertbildung die Favre-Mittelung als zweckmäßig erwiesen. Diese dichtegewichtete Mittelung ist definiert als [96]:

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}} \quad (4.24)$$

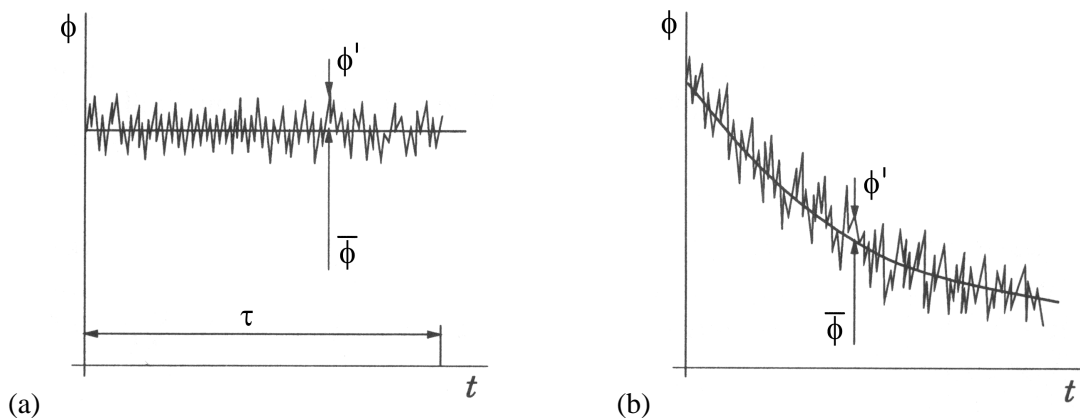
Analog zu Gl. (4.21) kann die Größe  $\phi$  wieder in einen Mittelwert und die Schwankung aufgespalten werden:

$$\phi(x, y, z, t) = \tilde{\phi}(x, y, z, t) + \phi''(x, y, z, t) \quad (4.25)$$

Die Favre-Mittelung findet vor allem bei Verbrennungs- ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.2.3) und Rußmodellen ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.3.1) Verwendung.

Wird die Mittelwertbildung auf die Größen  $\rho$ ,  $u$  und  $p$  in den Gleichungen (4.4) und (4.11) angewandt, ergeben sich die zeitlich gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (RANS) oder kurz Reynolds-Gleichungen [93]:

$$\nabla \bar{u} = 0 \quad (4.26)$$



**Abb. 4.2.** (a) Zeitliche Mittelung einer statistisch stationären Größe  $\phi$ ; (b) Ensemble-Mittelung einer statistisch instationären Größe  $\phi$  [14].

$$\rho \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = -\rho \bar{u} \nabla \bar{u} - \nabla \tau_t + \mu \nabla \bar{u} - \nabla \bar{p} + \rho g \quad (4.27)$$

Der in Gl. (4.27) neu auftretende Term  $\tau_t$  wird als Reynolds-Spannungs-Tensor bezeichnet und setzt sich aus der molekularen Schubspannung  $\tau$  und den sogenannten Reynolds-Spannungstermen zusammen:

$$\tau_t = \tau - \rho \overline{u'u'}. \quad (4.28)$$

Die Anwesenheit der Reynolds-Spannungsterme führt dazu, dass die Bilanzgleichungen mehr Unbekannte als Bestimmungsgleichungen enthalten, das Gleichungssystem ist also nicht geschlossen. Zur Bestimmung der Reynolds-Spannungen müssen daher Modelle eingeführt werden, die über bestimmte Annahmen die vereinfachte Berechnung des Reynolds-Spannungs-Tensors ermöglichen. Es wird dabei zwischen den Wirbelviskositätsmodellen und den Reynolds-Spannungs-Modellen unterschieden.

#### 4.3.1.2.1 k-ε Turbulenzmodell

Die in der Verfahrenstechnik gegenwärtig am häufigsten eingesetzten Modelle basieren auf dem Konzept der Wirbelviskosität. Es wird dabei angenommen, dass wie im Fall der laminaren Strömung, der Energie- und Stofftransport normal zur Strömungsrichtung durch einen Viskositätsterm bestimmt wird. Die in den laminaren Strömungen verwendete stoffspezifische Viskosität  $\mu$  wird dazu durch die turbulente Viskosität  $\mu_t$  ersetzt. Analog zu Gl. (4.7) ergibt sich der Reynolds-Spannungs-Tensor nach einem Ansatz von Boussinesq [93,97] aus:

$$\tau_t = \mu_t \left( \nabla u + (\nabla u)^T \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta. \quad (4.29)$$

Gleichung (4.29) enthält die turbulente kinetische Energie  $k$ . Diese ist definiert über:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'^2}. \quad (4.30)$$

Während die molekulare Viskosität  $\mu$  stoffspezifisch ist, hängt die turbulente Viskosität  $\mu_t$  vom System und den darin auftretenden Größen ab. Sie ist bei deutlich turbulenten Strömungen um mehrere Größenordnungen höher als die molekulare Viskosität, so dass Letzterer eine untergeordnete Bedeutung zukommt.

Durch Einsetzen von  $\tau_t$  gemäß Gl. (4.29) in die gemittelte Impulsbilanz (4.27) ergibt sich

$$\frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} = -\rho \bar{u} \nabla \bar{u} - \nabla \left( (\mu + \mu_t) \left( \nabla u + (\nabla u)^T \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta \right) - \nabla \bar{p} + \rho g. \quad (4.31)$$

Zur Bestimmung der turbulenten Viskosität wurden verschiedene Ansätze entwickelt. Sie werden nach der Zahl ihrer partiellen Differentialgleichungen in Null-, Ein- und Zwei-Gleichungsmodelle unterschieden. Der Prandtlsche Mischungslängenansatz [93,98] ist ein Beispiel für ein klassisches Null-Gleichungsmodell und setzt  $\mu_t$  proportional zum Quadrat des Durchmessers der größten Wirbel und des Geschwindigkeitsgradienten. Typische Ein-

Gleichungsmodelle bestimmen  $\mu_t$  über die turbulente kinetische Energie  $k$ . Dazu wird für  $k$  eine partielle Differentialgleichung definiert.

Zurzeit werden meist  $k$ - $\varepsilon$ - und  $k$ - $\omega$ -Modelle in praxisnahen Simulationen herangezogen. Neben einer Gleichung für  $k$  wird eine zusätzliche Gleichung für die Dissipationsrate  $\varepsilon$  der turbulenten kinetischen Energie bzw. für die Wirbelstärke  $\omega$  eingeführt. Beide Modelle zählen also zu den Zwei-Gleichungs-Modellen. Die Stärke der  $k$ - $\omega$ -Modelle liegt gegenüber den  $k$ - $\varepsilon$ -Modellen im wandnahen Bereich [95], wodurch sie besonders in der Aerodynamik eine weite Verbreitung erlangt haben. Die im Rahmen dieser Arbeit eingesetzte Software CFX bietet weiterhin eine Kombination unter dem Namen Shear-Stress-Transport Model (SST) an, bei der die Turbulenz in den wandnahen Bereichen mit einem  $k$ - $\omega$ -Modell und in den übrigen Bereichen mit einem  $k$ - $\varepsilon$ -Modell berechnet wird. Da bei der im Rahmen dieser Arbeit erfolgten Simulation frei brennender Flammen ausschließlich am Boden und am Pool Wände als Begrenzung vorliegen, also in den Bereichen, in denen die Strömungsgeschwindigkeit sehr geringe Werte annimmt, wird von einem Einsatz des  $k$ - $\omega$ -Modells abgesehen und stattdessen das  $k$ - $\varepsilon$ -Modell als Turbulenzmodell eingesetzt. Auf dieses wird daher im Folgenden näher eingegangen.

Das von Launder, Jones und Spalding [99,100] entwickelte  $k$ - $\varepsilon$ -Modell geht von der Annahme isotroper und voll ausgebildeter Turbulenz aus. Die turbulente Viskosität wird über die turbulente kinetische Energie und ihre Dissipationsrate berechnet:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} . \quad (4.32)$$

Die Konstante  $C_\mu$  wurde empirisch zu 0.09 bestimmt. Die Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie ist gegeben durch die Gleichung [93]

$$\varepsilon = \frac{\nu}{2} \overline{|\nabla \mathbf{u}' + \nabla \mathbf{u}'^T|^2} , \quad (4.33)$$

mit der kinematischen Viskosität  $\nu = \mu/\rho$ . Die Bilanzgleichungen für  $k$  und  $\varepsilon$  lauten dann

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} = -\nabla(\bar{u} \rho k) + \nabla \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \nabla k \right) + \hat{P}_k - \rho \varepsilon , \quad (4.34)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} = -\nabla(\bar{u} \rho \varepsilon) + \nabla \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \hat{P}_k - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} . \quad (4.35)$$

Die Gleichungen (4.34) und (4.35) besitzen die typischen Terme einer Bilanzgleichung. Der erste Term der rechten Seite stellt jeweils den konvektiven Transport dar, der jeweils zweite Term beschreibt den turbulenten Transport. Der dritte Term beschreibt die Zunahme der beiden Größen, wobei eine Erhöhung der turbulenten kinetischen Energie ebenso eine Erhöhung ihrer Dissipationsrate verursacht. Die Senken bilden den letzten Term der beiden Gleichungen. Eine Erhöhung der Dissipationsrate bedeutet eine Verringerung der turbulenten kinetischen Energie, eine niedrigere Energie wiederum bewirkt eine Abnahme ihrer Dissipationsrate.

Der Produktionsterm der turbulenten Energie ist in CFX definiert als [95]



$$\hat{P}_k = \mu_t \nabla \bar{u} (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T) - \frac{2}{3} \nabla (\bar{u} (\mu_t \nabla \bar{u} + \rho k)) + \hat{P}_{kb}. \quad (4.36)$$

Der zweite Term der rechten Seite ist in inkompressiblen Fluiden sehr klein und trägt nur unwesentlich zum Produktionsterm bei. In kompressiblen Fluiden erreicht der zweite Term nur in Gebieten hoher Divergenz relativ große Werte, z.B. in Stoßwellen. Der letzte Term ist der durch die Auftriebskräfte bedingte Produktionsterm. Er ist gegeben durch [95]

$$\hat{P}_{kb} = -\frac{\mu_t}{\rho \sigma_\rho} g \nabla \rho, \quad (4.37)$$

und geht so direkt in die Bilanzgleichung (4.34) für  $k$  ein. In der Bilanzgleichung (4.35) für  $\varepsilon$  wird der Produktionsterm nur berücksichtigt, wenn er positiv ist [95]:

$$\hat{P}_{\varepsilon b} = C_3 \max(0, \hat{P}_{kb}). \quad (4.38)$$

Die Konstanten in den Gleichungen (4.34) bis (4.38) werden empirisch üblicherweise so gewählt, dass drei bekannte turbulente Strömungsfälle durch das Modell richtig wiedergegeben werden. Als Problemstellung werden in der Regel die Turbulenz hinter einem Gitter, die turbulente Scherströmung und die turbulente Strömung über eine ebene Platte gewählt [88]. Daraus ergibt sich ein Satz von Konstanten für das  $k$ - $\varepsilon$ -Modell ( $\rightarrow$  Tab. 4.1), die unverändert im CFX-Löser verwendet werden.

**Tab. 4.1.** Konstanten im  $k$ - $\varepsilon$ -Modell [93, 95].

$C_\mu$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_3$	$\sigma_\varepsilon$	$\sigma_k$	$\sigma_\rho$
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3	1.0	1.0

Das Standard- $k$ - $\varepsilon$ -Modell wurde für Strömungen mit relativ hohen Reynoldszahlen wie z.B. in Strahlflammen entwickelt [100]. Naturgemäß ist es damit nicht für alle Strömungen gleich gut geeignet. Aus diesem Grund wurden für verschiedene Anwendungsfälle durch Erweiterungen, die weitere Terme und Konstanten enthalten können, spezielle Varianten entwickelt. Zu diesen zählen beispielsweise das RNG- $k$ - $\varepsilon$ -Modell (Renormalisation Group), das für Strömungen mit stark gekrümmten Stromlinien und großen Spannungsgradienten bestimmt ist, oder auch das Low-Re- $k$ - $\varepsilon$ -Modell, das Strömungen mit nicht voll ausgeprägter Turbulenz beschreiben soll. Da im Vorfeld häufig nicht abzuschätzen ist, welches Modell die genauesten Ergebnisse erzielt und die erweiterten Modelle zudem oft mehr Rechenzeit beanspruchen, wird dennoch meist das Standardmodell eingesetzt [93].

Das Standard- $k$ - $\varepsilon$ -Modell zeichnet sich durch seine numerische Stabilität aus und ist leicht zu implementieren. Außerdem benötigt es im Vergleich zu den Reynolds-Spannungs-Modellen ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.1.2.2) und vor allem gegenüber den Large-Eddy-Simulationen ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.1.3) verhältnismäßig geringe Rechenzeiten.

#### 4.3.1.2.2 Reynolds-Spannungs-Modelle

In den Reynolds-Spannungs-Modellen erfolgt die Bestimmung der turbulenten Viskosität nicht über die Wirbelviskosität entsprechend Gl. (4.29), sondern es werden partielle Differen-

tialgleichungen für alle sechs Reynolds-Spannungs-Terme in Gl. (4.28) formuliert. Dadurch entfällt die Annahme der isotropen Turbulenz was im Prinzip zu einer genaueren Beschreibung von komplexen Strömungen führen sollte. Die Erfahrung zeigt jedoch, dass mit den Reynolds-Spannungs-Modellen häufig keine besseren Ergebnisse als mit den Zwei-Gleichungs-Modellen erzielt werden [14,93].

Die partiellen Differentialgleichungen für die Reynolds-Spannungen enthalten Korrelationen für die Geschwindigkeitsfluktuationen und Kopplungen von Geschwindigkeitskomponenten mit dem Druck. Die Anwendung auf reaktive, kompressible Strömungen erfordert Modellterme, die sehr komplex ausfallen. Die Löser CFX-5 bzw. CFX-10 bieten drei Varianten des Reynolds-Spannungs-Modells an. Die Varianten LRR-IP und LRR\_QI stammen von Launder, Reece and Rodi [101], die dritte Variante SSG von Speziale, Sarkar und Gatski [102].

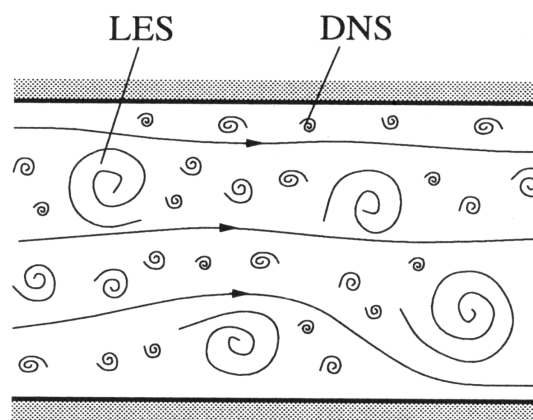
Modellierungen mit Reynolds-Spannungs-Modellen bedeuten einen deutlich höheren Rechenaufwand. Zusätzlich zu den sechs Gleichungen für alle Reynolds-Spannungs-Terme wird mindestens eine weitere Gleichung zur Bestimmung der turbulenten Längenskalen benötigt. Im Vergleich zum  $k$ - $\varepsilon$ -Modell werden also mindestens fünf partielle Differentialgleichungen mehr benötigt.

Da das Reynolds-Spannungs-Modell im Rahmen dieser Arbeit nicht eingesetzt wurde, wird an dieser Stelle auf eine detaillierte Beschreibung der Modellgleichungen verzichtet.

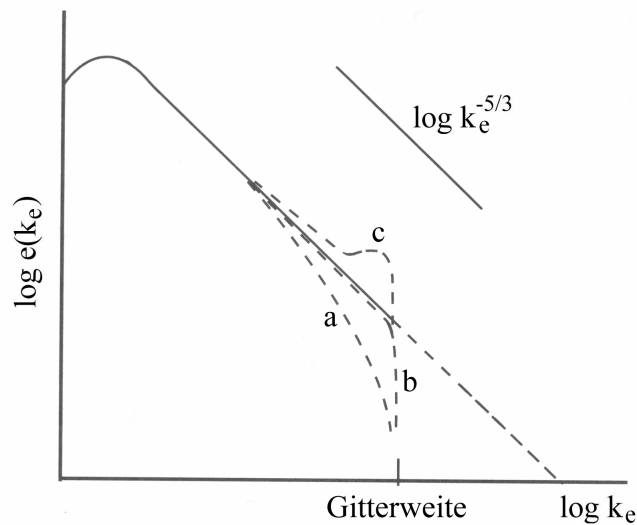
#### 4.3.1.3 Large-Eddy-Simulationen

Large-Eddy-Simulationen (LES) verfolgen einen völlig anderen Ansatz zur Turbulenzberechnung als die Reynolds-gemittelten Modelle und erlauben eine deutlich genauere Beschreibung eines turbulenten Strömungsfeldes.

Turbulente Strömungen beinhalten eine Vielzahl an Wirbeln, deren Zeit- und Längenskalen einen weiten Bereich abdecken. Die Variation der Längenskalen ist in Abb. 4.3a verdeutlicht. Die großen Wirbel besitzen eine deutlich höhere Energie und durch ihre Größe und Stärke



**Abb. 4.3.** Schematische Darstellung einer turbulenten Strömung mit Wirbeln verschiedener Größe nach Ferziger [14]: Bei der LES werden die Wirbel größerer Zeit- und Längenskalen direkt berechnet, nur bei der DNS werden auch die kleinsten Längenskalen aufgelöst.



**Abb. 4.4.** Einfluss verschiedener Algorithmen auf das berechnete turbulente Energiespektrum [89]: (a) der Algorithmus ist zu diffusiv; (b) MILES Algorithmus; (c) der Algorithmus blockiert die Energiedissipation.

bestimmen sie im Wesentlichen den Transport der Bilanzgrößen normal zur bzw. entgegen der Hauptströmungsrichtung ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.1.1). In Large-Eddy-Simulationen werden deshalb die großen Wirbel direkt berechnet, die kleinen Energiearmen werden hingegen über Modelle beschrieben. Es liegt am Benutzer, das Rechengebiet so zu diskretisieren, dass die Zelldimensionen deutlich kleiner als die Längenskalen der energiereichen Wirbel ausfallen. Die Wirbel, die in dem Rechengitter nicht mehr aufgelöst werden können, werden über sogenannte subgrid-scale-Modelle (SGS-Modelle) eingebunden. Ein sehr verbreitetes SGS-Modell ist z.B. das von Smagorinsky [14,93], das auf einem Wirbelviskositätsansatz beruht, der dem in RANS-Modellen ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.1.2.1) sehr ähnlich ist.

Neben der getrennten Berechnung der Wirbel in den beiden Skalenbereichen kommt noch ein dritter entscheidender Schritt hinzu. Es muss eine geeignete Methode zur Kopplung der subgrid-scale-Modelle mit den Ergebnissen der direkten numerischen Berechnung eingebunden werden. Abb. 4.4 verdeutlicht, dass das Spektrum der turbulenten kinetischen Energie kontinuierlich verläuft. Je nach verwendetem Algorithmus zur direkten numerischen Berechnung der größeren Wirbel, können am Ende des aufgelösten Längenbereiches (grid cut-off) verschiedene numerisch bedingte Effekte auftreten. Ermöglicht der eingesetzte Algorithmus keine ausreichende Dissipation der Energie, wird diese im Bereich der kleinen Längenskalen akkumuliert ( $\rightarrow$  Abb. 4.4c). Die aufgestaute Energie kann dann auf größere Wirbel einwirken und führt zu unrealistischen Ergebnissen. Andere Algorithmen führen die Umwandlung der kinetischen Energie in Wärme für kleine, noch aufgelöste Skalen ein ( $\rightarrow$  Abb. 4.4a und b). Weitete sich dieser Effekt zu sehr auf größere Skalen aus, hat das eine zu starke Dissipation der Energie zur Folge ( $\rightarrow$  Abb. 4.4a).

Um das Problem am Übergang zwischen aufgelösten und modellierten Skalen zu umgehen, werden in Large-Eddy-Simulationen Filterfunktionen eingeführt. Sie unterdrücken einerseits die ungewünschten numerischen Effekte am cut-off des Gitters, andererseits dienen sie als Grundlage für die Beschreibung der Transportprozesse unterhalb der Gittergröße. Konventionelle LES lösen also nicht die Navier-Stokes-Gleichungen direkt, sondern einen abgeleiteten

Satz von Gleichungen für gefilterte Größen. Dazu wird die Bilanzgröße  $\phi$  in einen großen, numerisch aufgelösten Teil  $\bar{\phi}$  und einen kleinen, nicht aufgelösten Teil  $\phi'$  aufgespalten [89]:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi'. \quad (4.39)$$

Der aufgelöste Teil wird über Volumenmittelung unter Berücksichtigung der Filterfunktion  $G$  gemäß

$$\bar{\phi}(x, y, z, t) = \int_V G(x - x', y - y', z - z') \phi(x', y', z', t) dx' dy' dz' \quad (4.40)$$

erhalten [89]. Als Filterfunktion können z.B. Top-Hat-Filter oder Gauß-Filter eingesetzt werden.

Die Gitterweite, unterhalb derer keine Wirbel mehr aufgelöst werden, kann vom Anwender frei gewählt werden. In der Regel ist für Large-Eddy-Simulationen allerdings eine wesentlich feinere Orts- und Zeitdiskretisierung erforderlich als z.B. bei RANS-Modellierungen. Als Maximum der Zeitschrittweite kann ein Wert von  $\Delta t \approx 10^{-4}$  s angenommen werden [95]. Die Berechnung der zeitlichen Entwicklung der einzelnen Bilanzgrößen über ein angemessenes Zeitintervall von mindestens  $\Delta t_{\text{ges}} = 30$  s ist allerdings beim momentanen Stand der Computertechnologie extrem zeitaufwendig.

Large-Eddy-Simulationen benötigen in Grenzschichten eine extrem feine Vernetzung der Geometrie. Daher werden zunehmend Kombinationen aus LES und RANS entwickelt, um dieses Problem zu umgehen. Bei den sogenannten Detached-Eddy-Simulationen [95] wird in Abhängigkeit von der Zellengröße zwischen RANS und LES umgeschaltet. Idealerweise sollen die instationären, anisotropen Turbulenzen in den von den Grenzschichten abgelösten Bereichen durch LES direkt berechnet werden. Die Grenzschichten hingegen werden mit RANS-Modellen simuliert. Dadurch kann die Rechenzeit oftmals erheblich gesenkt werden. Die Ergebnisse sind jedoch unmittelbar vom Gitter abhängig, der Ablösepunkt der Wirbel von der Grenzschicht kann durch ungeeignete Zellengrößen negativ beeinflusst werden.

## 4.3.2 Verbrennungsmodelle

### 4.3.2.1 Speziesquellterme aufgrund chemischer Reaktionen

In reaktiven Strömungen wird in der Regel für  $i-1$  Spezies jeweils eine Bilanzgleichung gemäß Gl. (4.15) gelöst ( $\rightarrow$  Kap. 4.2.5). Die Änderungen der Speziesmassenanteile  $Y_i$  aufgrund chemischer Reaktionen wird über den Quellterm  $S_i$  berücksichtigt. Dazu werden zunächst alle Reaktionen aller Spezies mit den stöchiometrischen Koeffizienten  $v'_{i,r}$  bzw.  $v''_{i,r}$  der Spezies  $i$  auf der Edukt- bzw. Produkt-Seite in der Reaktion  $r$  folgendermaßen formuliert:

$$\sum_{i=A,B,C,\dots}^{N_S} v'_{i,r} i = \sum_{i=A,B,C,\dots}^{N_S} v''_{i,r} i \quad (4.41)$$

Der Quellterm  $S_i$ , der zur Erhöhung bzw. Abnahme des Massenanteils einer Spezies beiträgt, berechnet sich dann als Summe der Änderungen bedingt durch alle Reaktionen:

$$S_i = M_i \sum_{r=1}^{N_r} (v''_{i,r} - v'_{i,r}) R_r \quad (4.42)$$

Die Reaktionsgeschwindigkeit  $R_r$  kann mit Hilfe verschiedener Modelle berechnet werden, z.B. mit einem Eddy-Break-Up-Modell [96], dem Eddy-Dissipations-Modell [103,104] oder einem Finite-Rate-Chemistry-Modell [95].

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Verbrennung der Brennstoffe Kerosin und Heptan modelliert. Die chemischen Reaktionen der beiden Brennstoffe werden mit zwei verschiedenen Ansätzen beschrieben und mit unterschiedlichen Modellen berechnet. Die Verbrennung von Kerosin wird mit dem Eddy-Dissipations-Modell berechnet ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.2.2), die Modellierung der Heptan-Verbrennung erfolgt mit einem Flamelet-Ansatz ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.2.3).

#### 4.3.2.2 Das Eddy-Dissipations-Modell am Beispiel der Kerosin-Verbrennung

Kerosin ist ein Stoffgemisch, dessen Zusammensetzung stark variieren kann. Es wird vor allem als Fluggturbinenkraftstoff genutzt. Es existieren Varianten wie Jet A-1 für die zivile Luftfahrt und z.B. JP4, JP5 und JP8, die in der militärischen Luftfahrt eingesetzt werden [105,106]. Der militärische Kraftstoff JP8, den die US-amerikanischen Luftwaffe seit 1996 anstelle von JP4 verwendet, wird dabei aus Jet A-1 durch Zusatz geringer Mengen verschiedener Additive hergestellt. Durch unterschiedliche Zusammensetzungen können beispielsweise einige Eigenschaften der Treibstoffe, wie z.B. der Flammpunkt, variiert werden. Je nach Verwendungszweck setzt sich daher das Kerosin unterschiedlich zusammen mit Volumenanteilen der Paraffine von etwa 30-50 %, der Cycloalkane von 27-53 Vol-% und der Aromaten von 16-24 Vol-% [107].

Da keine eindeutige Zusammensetzung für Kerosin angegeben werden kann, geht es in Berechnungen in der Regel idealisiert als Reinstoff oder auch als binäres Gemisch ein. In den Gemischen wird Kerosin meist als gesättigter Kohlenwasserstoff mit einer Kettenlänge von 10 bis 12 Kohlenstoffatomen angesehen und eventuell ein weiterer, möglicherweise ein aromatischer Anteil wie z.B. n-Propylbenzen [108], eingeführt. Im Rahmen dieser Arbeit wird Kerosin als Undekan angesehen, ein aromatischer Anteil wird nicht berücksichtigt.

Für die Verbrennung allein von Dekan oder einem längerkettigen Kohlenwasserstoff lassen sich mehr als 1000 mögliche Elementarreaktionen mit über 100 Spezies formulieren. Der Rechenaufwand für die detaillierte Berechnung so aufwendiger Reaktionsnetzwerke in dreidimensionalen anwendungsbezogenen Systemen übersteigt momentan die Kapazitäten auch moderner Computersysteme. Daher ist die Einführung reduzierter Reaktionsmechanismen unumgänglich. Die Beschreibung von Verbrennungsreaktionen mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen, bei denen die Anzahl der benötigten Reaktionen deutlich reduziert werden kann, ist in Kap. 4.3.2.3 für den Brennstoff Heptan beschrieben. Die Kerosinverbrennung wird im Gegensatz dazu mit einer Globalkinetik unter Verwendung des Eddy-Dissipations-Modells für beschrieben.

Das Eddy-Dissipations-Modell wurde von Magnussen und Hjertager [103,104] für Verbrennungsprozesse entwickelt, in denen die chemischen Reaktionen im Vergleich zu den Transportprozessen im System wesentlich schneller ablaufen. Das Verhältnis der beiden Zeitskalen wird durch die turbulente Damköhler-Zahl ausgedrückt [95]:

$$Da = \frac{t_t}{t_{\text{chem}}} . \quad (4.43)$$

Es wird angenommen, dass bei einer Mischung der Edukte unter genügend hohen Temperaturen eine augenblickliche Reaktion erfolgt. Das hat zur Folge, dass die Reaktionsgeschwindigkeit direkt von den Mischungsprozessen abhängt. Ausgehend von der Betrachtung der Wirbel- bzw. Energiekaskade, bei der große Wirbel in kleinere Wirbel unter Energieverlust zerfallen ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.1.1), wird angenommen, dass die zur Verbrennung erforderliche molekulare Mischung der Edukte in den kleinsten Wirbelstrukturen erfolgt. In turbulenten Strömungen hängen diese von den Wirbeleigenschaften ab und sind daher proportional zur Mischungszeit, definiert durch die turbulente kinetische Energie und ihre Dissipation:

$$R_r \propto \frac{\varepsilon}{k} \quad (4.44)$$

Dieser Ansatz ist für viele industrielle Verbrennungsprozesse zutreffend [95], und auch in großen Poolflammen ist diese Vereinfachung sinnvoll. Unter der Annahme, dass die Reaktionen von der Geschwindigkeit des Mischungsprozesses gesteuert werden, wird in den Modellierungen die Verbrennung von Kerosin als Ein-Schritt-Reaktion von Undekan mit Sauerstoff formuliert:



Im Eddy-Dissipations-Modell wird die Geschwindigkeit der Reaktion  $r$  durch den kleineren der beiden folgenden Terme bestimmt [95]:

$$R_r = A \frac{\varepsilon}{k} \min \left( \frac{[i]}{v'_{i,r}} \right) \quad (4.45)$$

$$R_r = AB \frac{\varepsilon}{k} \left( \frac{\sum_P [i] M_i}{\sum_P v''_{i,r} M_i} \right) \quad (4.46)$$

Gl. (4.45) beschreibt dabei die Abhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit von den Edukten  $E$ , bzw. von dem Edukt mit der kleinsten Konzentration. Die Produkte gehen nicht in den Term ein. Als Konstante wird ein Wert von  $A = 4$  eingesetzt [95]. Gl. (4.46) beschreibt die Abhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit von den Produkten  $P$ . Dieser Term ist insbesondere bei vorgemischten Flammen von Interesse, da hier ein kalter Brennstoffstrom auf einen heißen Produktstrom trifft, wodurch die Reaktion initiiert wird.

#### 4.3.2.3 Das Flamelet-Modell am Beispiel der Heptan-Verbrennung

Nicht vorgemischte Flammen zeichnen sich in der Regel durch einen diffusiven Transport von Brennstoff und Oxidationsmittel zur Flammenzone aus, der langsam gegenüber den chemischen Reaktionen ist [95,96]. Da die molekulare Mischung unterhalb der Ebene der kleinsten Wirbel stattfindet erfolgt die Verbrennung dann an der Oberfläche von theoretisch infinit

dünnen Schichten, bzw. Schichten die kleiner als das Kolmogorov-Längenmaß sind. Diese eindimensionalen, laminaren Flammenfronten werden fortan als Flamelets bezeichnet. Der Einfluss der Turbulenz drückt sich in der Faltung und Dehnung der Flamelets aus, die chemische Struktur wird durch sie jedoch nicht beeinflusst.

Da der Mischungsprozess u. a. stark von der Diffusion abhängt, lässt er sich einfacher beschreiben, wenn für alle Skalare derselbe Diffusionskoeffizient angenommen wird. Dann verläuft die Mischung aller Spezies gleich schnell, und es muss nur die Mischung einer einzigen Variablen verfolgt werden. Da chemische Spezies durch Reaktionen gebildet oder verbraucht werden, ist es einfacher die Mischung anhand der Elemente zu betrachten, deren Anteile unverändert bleiben. Dazu wird in einem Zwei-Strom-System der Mischungsbruch [95,96]

$$\xi = \frac{Z_j - Z_{j,2}}{Z_{j,1} - Z_{j,2}} \quad (4.47)$$

mit den Massenbrüchen  $Z$  der Elemente  $j$

$$Z_j = \sum_{i=1}^{N_s} \frac{a_{ij} M_j}{M_i} Y_i \quad (4.48)$$

und den molaren Massen  $M$  und den Massenanteilen  $Y$  der Spezies  $i$  definiert. Die Indices 1 und 2 beziehen sich auf den jeweiligen Stoffstrom. Da per Definition alle Diffusionskoeffizienten gleich sind, ändert sich in den beiden Strömen das Verhältnis zwischen den Elementen nicht. Es lässt sich leicht zeigen [96], dass dann der Massenbruch unabhängig vom betrachteten Element ist:

$$\xi_1 = \xi_2 = \dots = \xi_{N_s} . \quad (4.49)$$

Als Randbedingung gilt  $\xi = 1$  im Brennstoffstrom und  $\xi = 0$  im Oxidatorstrom. Der Mischungsbruch kann als der Massenbruch des Materials gedeutet werden, aus dem Strom 1 gebildet wird. Der Mischungsbruch des Materials in Strom 2 ist dann  $1-\xi$ . Durch Summierung aller Speziesbilanzgleichungen lässt sich eine Erhaltungsgleichung für den Massenbruch herleiten [95,96]:

$$\frac{\partial(\rho\xi)}{\partial t} + \nabla(\rho\xi) = \nabla(\rho D \nabla \xi). \quad (4.50)$$

Die einzelnen Quellterme der Spezies löschen sich gegenseitig aus. Der Massenbruch ist also erwartungsgemäß unabhängig von den chemischen Reaktionen, denn er bezieht sich auf chemische Elemente, die nicht durch chemische Reaktionen verbraucht oder gebildet werden. Da die Bilanzgleichung also quelltermfrei ist, wird  $\xi$  auch als skalare Erhaltungsgröße bezeichnet (conserved scalar) [96].

Unter der Annahme, dass das Verhältnis von Stoff- zu Wärmetransport, ausgedrückt durch die Lewis-Zahl

$$\text{Le} = \frac{\lambda}{\rho c_p D}, \quad (4.51)$$

gleich Eins ist und im System keine Wärmeverluste auftreten, kann auch das Enthalpie- bzw. Temperaturfeld mitbeschrieben werden. Zur Beschreibung der Lage der Flächen stöchiometrischer Zusammensetzung  $\xi = \xi_{\text{st}}$  wird ein neues, lokal definiertes Koordinatensystem eingeführt dessen  $x_2$ - und  $x_3$ -Koordinaten innerhalb der Reaktionszone liegen. Die  $x_1$ -Koordinate wird als senkrecht zur Reaktionszone definiert und kann unter der Annahme, dass diese infinit dünn ist, durch den Mischungsbruch  $\xi$  ersetzt werden [95,109]. Daraus ergeben sich folgende Transformationsregeln:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad (4.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial \xi}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad (4.53)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial \xi_k} + \frac{\partial \xi}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial \xi}. \quad (4.54)$$

Beispielhaft soll diese Transformation an der Temperatur verdeutlicht werden. Die Temperaturgleichung ist in CFX folgendermaßen gegeben [95]:

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u_\alpha \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left( \rho D \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right) = \sum_{k=1}^r \frac{Q_k}{c_p} \omega_k + \frac{q_R}{c_p} + \frac{1}{c_p} \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (4.55)$$

Die drei Terme auf der rechten Seite repräsentieren chemische Reaktionen, die Strahlung und den transienten Druck. Letzterer wirkt sich bei schnellen Druckänderungen wie z.B. in Kolbenmotoren auf die Temperatur aus. Die Anwendung der Transformationen auf Gl. (4.55) führt bei einer konstanten Lewis-Zahl zu [95]

$$\begin{aligned} & \rho \left( \frac{\partial T}{\partial \tau} + u_2 \frac{\partial T}{\partial \xi_2} + u_3 \frac{\partial T}{\partial \xi_3} \right) - \frac{\partial (\rho D)}{\partial x_2} \frac{\partial T}{\partial \xi_2} - \frac{\partial (\rho D)}{\partial x_3} \frac{\partial T}{\partial \xi_3} \\ & - \rho D \left[ \left( \frac{\partial \xi}{\partial x_\alpha} \right)^2 \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} + 2 \frac{\partial \xi}{\partial x_2} \frac{\partial^2 T}{\partial \xi \partial \xi_2} + \frac{\partial \xi}{\partial x_3} \frac{\partial^2 T}{\partial \xi \partial \xi_3} + \frac{\partial^2 T}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial \xi_3^2} \right] \\ & = \frac{1}{\rho c_p} \sum_{i=1}^{N_S} h_i \dot{m}_i + \frac{q_R}{c_p} + \frac{1}{c_p} \frac{\partial p}{\partial t}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Da die Flamelets sehr dünn sind, nehmen nur die Gradienten normal zur Fläche stöchiometrischer Mischung große Werte an. Wird dies berücksichtigt, indem die Terme, die keine zweite Ableitung bezogen auf den Mischungsbruch  $\xi$  besitzen, vernachlässigt werden, vereinfacht sich die Gleichung zu [95]

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\chi_{\text{st}}}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} = \frac{1}{\rho c_p} \sum_{i=1}^{N_S} h_i \dot{m}_i + \frac{q_R}{c_p} + \frac{1}{c_p} \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (4.57)$$



Ein wichtiger Parameter in Gl. (4.57) ist die skalare Dissipationsrate  $\chi_{st}$ . Sie repräsentiert den Einfluss des Strömungsfeldes auf die Reaktionszone und ist gegeben durch [95,109]:

$$\chi_{st} = 2D_{st}(\nabla\xi)_{st}^2. \quad (4.58)$$

Die Reaktionszone wird durch das Strömungsfeld gestreckt und durch Diffusion gestaucht. Bei einer kritischen skalaren Dissipationsrate  $\chi_{cr}$  ist die Reaktionszone so dünn, dass der Wärmeverlust durch Leitung nicht mehr kompensiert werden kann. Die Temperaturen sinken dadurch örtlich stark ab und die Flamme erlischt an dieser Stelle. Dies ist von großer Bedeutung, da durch diesen Parameter sichergestellt ist, dass auch eine turbulente Flamme durch ein Ensemble eindimensionaler Flammen beschrieben werden kann. Die skalare Dissipationsrate  $\chi_{st}$  und der Druck  $p$  werden als die sogenannten Flamelet-Parameter bezeichnet [109].

Um die wechselseitigen Einflüsse von Turbulenz und Flamelet-Modell berücksichtigen zu können, werden zwei Bilanzgleichungen benötigt. Die Erste wird für den Favre-gemittelten Mischungsbruch benötigt [95]:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\xi})}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho}u\tilde{\xi}) = \nabla\left[\bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_\xi} \nabla\tilde{\xi}\right]. \quad (4.59)$$

Statistische Informationen werden aus der Varianz des Favre-gemittelten Mischungsbruches berechnet [95]:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\xi}''^2)}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho}u\tilde{\xi}''^2) = \nabla\left[\bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_{\xi''^2}} \nabla\tilde{\xi}''^2\right] + 2\frac{\mu_t}{\sigma_\xi}(\nabla\tilde{\xi})^2 - \bar{\rho}\tilde{\chi}. \quad (4.60)$$

Die Struktur der Gl. (4.60) ist fast gleich der in Gl. (4.59). Die beiden zusätzlichen Terme repräsentieren die Produktion und die Dissipation der Varianz. Die Dissipation wird in CFX über folgende empirische Korrelation bestimmt:

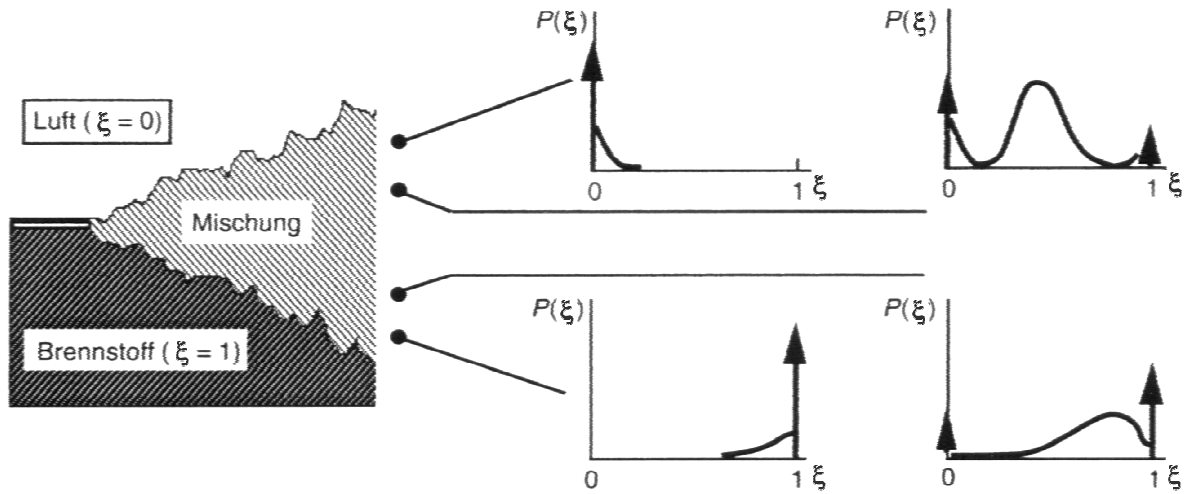
$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\tilde{\xi}}{\tilde{k}} \xi''^2. \quad (4.61)$$

mit den Konstanten  $\sigma_\xi = \sigma_{\xi''^2} = 0.9$ ,  $C_\chi = 2.0$ .

Die Favre-gemittelte Zusammensetzung des Fluids ist eine Funktion des Favre-gemittelten Mischungsbruchs, seiner Varianz und der skalaren Dissipationsrate:

$$\tilde{Y}_i = \tilde{Y}_i(\tilde{\xi}, \tilde{\xi}''^2, \tilde{\chi}) = \int_0^1 Y_i(\xi, \chi_{st}) P_{\tilde{\xi}, \tilde{\xi}''^2}(\xi) d\xi. \quad (4.62)$$

Die Funktion  $P$  ist eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (probability density function, pdf). Sie kommen bei der statistischen Beschreibung der Flammeneigenschaften zum Einsatz. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion eines Fluids gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit das Fluid an einem bestimmten Ort  $\vec{r}$  eine Dichte zwischen  $\rho$  und  $\rho + d\rho$  besitzt, die Geschwindigkeit in x-Richtung zwischen  $u_x$  und  $u_x + du_x$ , die in y-Richtung zwischen  $u_y$  und  $u_y + du_y$  und die in z-Richtung zwischen  $u_z$  und  $u_z + du_z$  liegen, die Temperatur sich im Bereich zwi-



**Abb. 4.5.** Schematische Darstellung von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für den Massenbruch des Brennstoffes in einer turbulenten Mischungsschicht [96].

schen  $T$  und  $T + dT$  befindet, sowie die lokalen Massenbrüche  $Y_i$  jeweils Werte zwischen  $Y_i$  und  $Y_i + dY_i$  annehmen [96]:

$$P(\rho, u_x, u_y, u_z, Y_1, \dots, Y_{N_S-1}, T; \vec{r}) d\rho du_x du_y du_z dY_1, \dots, dY_{N_S-1} dT. \quad (4.63)$$

In dieser Arbeit wird eine aus empirischen Daten konstruierte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion verwendet. Dazu wird in der Regel zunächst eine statistische Unabhängigkeit bezüglich der einzelnen Variablen der pdf angenommen. Dadurch lässt sich die mehrdimensionale pdf als ein Produkt eindimensionaler pdf formulieren [96]:

$$P(\rho, u_x, u_y, u_z, Y_1, \dots, Y_{N_S-1}, T; \vec{r}) = P(\rho) P(u_x) P(u_y) P(u_z) P(Y_1), \dots, P(Y_{N_S-1}) P(T). \quad (4.64)$$

Da einerseits die einzelnen Variablen nicht unabhängig voneinander sind, müssen zusätzliche Korrelationen zwischen ihnen eingeführt werden. Andererseits können eindimensionale pdf aus Experimenten ermittelt werden, worin der entscheidende Vorteil der obigen Separation liegt.

Abb. 4.5 zeigt exemplarisch eine schematische Darstellung von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für den Massenbruch des Brennstoffs in einer turbulenten Mischungsschicht, die so z.B. am Rand einer Poolflamme auftreten kann. Am Rand der Mischungsschicht ist die Wahrscheinlichkeit reinen Brennstoff bzw. reine Luft vorzufinden relativ hoch. Innerhalb der Mischung nimmt die Wahrscheinlichkeit, eine der beiden Komponenten ungemischt vorzufinden, deutlich ab, eine Mischung ist hier wahrscheinlicher. Dennoch ist für eine feste Ortskoordinate die Wahrscheinlichkeit eine der beiden Komponenten ungemischt vorzufinden nicht gleich Null, da sich durch Fluktuationen die örtlichen Grenzen der Reaktionszonen stets verlagern.

Zur analytischen Beschreibung solcher eindimensionaler pdf werden je nach Anwendung unterschiedliche Funktionen wie z.B. Gauß-, abgeschnittene (gestutzte) Gauß-Funktionen

oder auch  $\beta$ -Funktionen [96] angewandt. Im Programmpaket CFX wird angenommen, dass  $P$  die Form einer  $\beta$ -Funktion annimmt [95]:

$$P_{\xi}(\xi, \bar{x}, t) = \frac{\xi^{\alpha-1} (1-\xi)^{\beta-1}}{\int_{\xi=0}^1 \xi^{\alpha-1} (1-\xi)^{\beta-1} d\xi} \quad (4.65)$$

mit

$$\alpha = \tilde{\xi} \gamma, \quad (4.66)$$

$$\beta = (1 - \tilde{\xi}) \gamma, \quad (4.67)$$

und

$$\gamma = \frac{\tilde{\xi}(1-\tilde{\xi})}{\tilde{\xi}''^2} - 1. \quad (4.68)$$

Durch Einsetzen des Mischungsbruches kann mit Hilfe der  $\beta$ -Funktion Gl. (4.62) integriert werden. Die Durchführung dieses Rechenschritts in jeder Zelle für jede Iteration würde einen erheblichen Rechenaufwand verursachen. Daher wird das Konzept der Look-Up Tabelle eingeführt. Bei diesem Konzept wird in einem Präprozessor die Integration in Abhängigkeit vom Mischungsbruch durchgeführt. Die für die verschiedenen Mischungsbrüche resultierenden Dichten, Strömungsgeschwindigkeiten, Spezieskonzentrationen und Temperaturen werden in der sogenannten Look-Up Tabelle gespeichert, so dass während der eigentlichen Simulation die rechenintensive Integration entfällt. Stattdessen können die zugehörigen Werte zum im Strömungsfeld berechneten Mischungsbruch direkt aus der Tabelle gelesen werden. Durch diese Rechenersparnis wird erst die Berücksichtigung zahlreicher Spezies und ihrer Elementarreaktionen mit den empirisch bestimmten Reaktionsgeschwindigkeiten möglich.

Im Fall der hier erfolgten Berechnung der Heptan-Verbrennung wird ein Reaktionsmechanismus nach Peters [111] verwendet, in dem 59 Spezies in 283 Elementarreaktionen miteinander reagieren. Ein Auszug der enthaltenen Reaktionen ist in Tab. 4.2 aufgeführt. Dort sind auch die Geschwindigkeitskoeffizienten der Arrhenius-Gleichung wiedergegeben:

$$k_r = A T^n e^{-\frac{E_A}{R T}}. \quad (4.69)$$

### 4.3.3 Rußmodellierung

#### 4.3.3.1 Rußmodellierung mit dem Magnussen-Modell

Das Rußmodell nach Magnussen [110] stellt eine direkte Erweiterung des Eddy-Dissipations-Modelles zur Berechnung von Verbrennungsprodukten wie Ruß und  $\text{NO}_x$  dar. Zur Berechnung der Rußbildung werden im Magnussen-Modell mehrere Schritte betrachtet:

1. Bildung von Rußbildnern in Form von Radikalen;
2. Bildung von Rußpartikeln aus den Radikalen;
3. Oxidation der Rußpartikel und Radikale;
4. Berechnung des Einflusses der Turbulenz auf die Reaktionsgeschwindigkeiten mit Magnussens Eddy-Dissipations-Modell.

Dazu werden zwei Größen benötigt, zum einen der Rußmassenanteil  $Y_S$  und zum anderen die spezifische Konzentration der Radikale  $X_{Nu}$ . Für den Favre-Mittelwert ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.1.2) der beiden Größen wird jeweils eine Bilanzgleichung eingeführt [95]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{X}_{Nu}}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{X}_{Nu}) = \left( \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \nabla \tilde{X}_{Nu} \right) + \tilde{S}_{Nu,f} + \tilde{S}_{Nu,c} \quad (4.70)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_S}{\partial t} + \nabla(\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{Y}_S) = \left( \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \nabla \tilde{Y}_S \right) + \tilde{S}_{Y_S,f} + \tilde{S}_{Y_S,c} . \quad (4.71)$$

**Tab. 4.2.** Auszug aus dem Heptan-Reaktionsmechanismus nach Peters [111]

Nummer	Reaktion	A	n	E <sub>A</sub>
1	$C_7H_{16} \rightarrow C_4H_9 + C_3H_7$	3.160E + 16	0.00	339
2	$C_7H_{16} + O_2 \rightarrow 1 - C_7H_{15} + HO_2$	6.000E + 13	0.00	221
3	$C_7H_{16} + O_2 \rightarrow 2 - C_7H_{15} + HO_2$	4.000E + 13	0.00	210
4	$C_7H_{16} + HO_2 \rightarrow 1 - C_7H_{15} + H_2O_2$	5.000E + 13	0.00	85.5
5	$C_7H_{16} + HO_2 \rightarrow 2 - C_7H_{15} + H_2O_2$	3.360E + 13	0.00	74
6	$C_7H_{16} + OH \rightarrow 1 - C_7H_{15} + H_2O$	1.050E + 10	0.97	6.65
7	$C_7H_{16} + OH \rightarrow 2 - C_7H_{15} + H_2O$	9.400E + 07	1.61	-0.146
8f	$1 - C_7H_{15} \rightarrow 2 - C_7H_{15}$	2.000E + 11	0.00	75.8
8b	$2 - C_7H_{15} \rightarrow 1 - C_7H_{15}$	2.000E + 11	0.00	75.8
9f	$1 - C_7H_{15} + O_2 \rightarrow C_7H_{15}O_2$	2.500E + 12	0.00	0
9b	$C_7H_{15}O_2 \rightarrow 1 - C_7H_{15} + O_2$	2.200E + 15	0.00	117
10f	$2 - C_7H_{15} + O_2 \rightarrow C_7H_{15}O_2$	2.500E + 12	0.00	0
10b	$C_7H_{15}O_2 \rightarrow 2 - C_7H_{15} + O_2$	2.200E + 15	0.00	117
11	$C_7H_{15}O_2 \rightarrow C_7H_{14}O_2H$	2.000E + 11	0.00	71.2
12	$C_7H_{14}O_2H + O_2 \rightarrow O_2C_7H_{14}O_2H$	5.600E + 12	0.00	0
13	$O_2C_7H_{14}O_2H \rightarrow HO_2C_7H_{13}O_2H$	2.000E + 11	0.00	71.2
14	$HO_2C_7H_{13}O_2H \rightarrow OC_7H_{13}O_2H + OH$	1.000E + 09	0.00	31.4
15	$OC_7H_{13}O_2H \rightarrow OC_7H_{13}O + OH$	8.400E + 14	0.00	180
16	$OC_7H_{13}O \rightarrow CH_2O + C_5H_{11} + CO$	2.000E + 13	0.00	62.8
17	$1 - C_7H_{15} \rightarrow C_5H_{11} + C_2H_4$	2.500E + 13	0.00	121
18	$2 - C_7H_{15} \rightarrow C_4H_9 + C_3H_6$	1.200E + 13	0.00	118
19	$C_5H_{11} \rightarrow C_2H_4 + C_3H_7$	7.972E + 17	-1.44	125
20	$C_4H_9 \rightarrow C_2H_5 + C_2H_4$	2.500E + 13	0.00	121
21	$C_3H_7 + O_2 \rightarrow C_3H_6 + HO_2$	1.000E + 12	0.00	20.9
22	$C_3H_6 + OH \rightarrow C_2H_5 + CH_2O$	7.900E + 12	0.00	0
23	$C_2H_5 + O_2 \rightarrow C_2H_4 + HO_2$	1.024e + 10	0.00	-9.15
24	$C_2H_4 + OH \rightarrow C_2H_3 + H_2O$	2.048E + 13	0.00	24.9
25	$C_2H_3 + O_2 \rightarrow CH_2O + CHO$	1.700E + 29	-5.31	27.2
26	$CH_2O + OH \rightarrow CHO + H_2O$	3.433E + 09	1.18	-1.9
27	$CHO + O_2 \rightarrow CO + HO_2$	3.011E + 12	0.00	0
28	$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$	4.400E + 06	1.50	-3.1
29	$2HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	1.867E + 12	0.00	6.44

Die beiden Bilanzgleichungen enthalten je einen Term für die Bildung (Index f) und die Oxidation (Index c) der jeweiligen Größe. Die Bildung der Radikale und des Rußes erfolgt nach Tesner et al. [112]. Die Bildungsterme lauten [110,95]

$$\tilde{S}_{Nu,f} = n_0 + (f - g)C_{Nu} - g_0 C_{Nu} C_S \quad (4.72)$$

und

$$\tilde{S}_{Y_S,f} = m_p + (a - b C_S)C_{Nu} , \quad (4.73)$$

mit der Partikeldichte der Radikale

$$C_{Nu} = \rho N_A X_{Nu} \quad (4.74)$$

und des Rußes

$$C_S = \rho \frac{Y_S}{m_p} . \quad (4.75)$$

Hier repräsentiert  $N_A$  die Avogadro-Konstante,  $m_p$  ist die Masse eines Rußpartikels:

$$m_p = \frac{\rho_S \pi d_S^3}{6} . \quad (4.76)$$

Die empirisch bestimmten Konstanten wie z.B. die Dichte des Rußes  $\rho_S$  oder der Partikeldurchmesser  $d_S$  sind in Tab. 4.3 aufgelistet. Die spontane Radikalbildung  $n_0$  in Gl. (4.72) berechnet sich wie folgt [110,95]:

$$n_0 = a_0 f_C \rho Y_S \exp(-T_{A,0}/T) . \quad (4.77)$$

Die Favre-gemittelten Raten der Oxidation von Rußpartikeln und Radikalen hängen direkt von den Quelltermen des Brennstoffs ab, und lauten im Fall der Kerosin-Verbrennung [95]:

$$\tilde{S}_{Nu,c} = \tilde{S}_{Y_{Kerosin}} \frac{\tilde{X}_{Nu}}{\tilde{Y}_{Kerosin}} \quad (4.78)$$

$$\tilde{S}_{Y_S,c} = \tilde{S}_{Y_{Kerosin}} \frac{\tilde{Y}_S}{\tilde{Y}_{Kerosin}} . \quad (4.79)$$

Nach den obigen Gleichungen hängen die Bildung und die Oxidation der Rußpartikel sowie der Radikale direkt vom Brennstoffmassenanteil ab. Diese Tatsache stellt numerisch einen großen Vorteil dar. Der Quellterm für den Brennstoff Kerosin wird mit dem Eddy-Dissipations-Modell berechnet und repräsentiert den Einfluss der Turbulenz auf die Verbrennung. Da der Quellterm bereits nach der Lösung der Brennstoffbilanzgleichung vorliegt, sind keine weiteren zeitaufwendigen Rechenschritte für die Berücksichtigung der Turbulenz auf die Rußbildung erforderlich. Diese direkte Abhängigkeit kann sich aber auch als nachteilig erweisen. Da der Brennstoffmassenanteil in den hier berechneten großen Poolflammen schon

in relativ niedrigen dimensionslosen Höhen  $x/d$  vor allem mit zunehmendem Abstand von der Flammenachse sehr kleine Werte annimmt, müssen die Oxidationsterme für die Rußpartikel und die Radikale in weiten Bereichen der Flamme ebenfalls sehr klein ausfallen. Betrachtet man den relativ komplizierten, im Kap. 2.6 beschriebenen Mechanismus der Rußbildung über die verschiedenen Zwischenschritte wie z.B. Keimbildung, Bildung der Primärpartikel, Teilchenwachstum und –oxidation, so stellt die Berechnung der Rußoxidation im Modell eine erhebliche Vereinfachung dar.

**Tab. 4.3.** Standardwerte der Parameter im Magnussen-Modell [95,110]

Parameter	Wert je Teilchen	Wert je mol
$\rho_s$		2000 kg /m <sup>3</sup>
$d_s$		$1.75 \cdot 10^{-8}$ [m]
$a_0$	$1.35 \cdot 10^{37}$ [1/(kg s)]	$2.24 \cdot 10^{13}$ [mol/(kg s)]
$f_C$	Kohlenstoffmassenanteil im Brennstoff (z.B. 12/16 für Methan)	
$T_{A,0}$		90000 [K]
$f-g$		100 [1/s]
$g_0$	$1.0 \cdot 10^{-15}$ [m <sup>3</sup> /s]	$6.02 \cdot 10^8$ [m <sup>3</sup> /(s mol)]
$a$		$1.0 \cdot 10^5$ [1/s]
$b$	$8.0 \cdot 10^{-14}$ [m <sup>3</sup> /s]	$4.98 \cdot 10^{10}$ [m <sup>3</sup> /(s mol)]

#### 4.3.3.2 Rußmodellierung mit dem Lindstedt-Modell

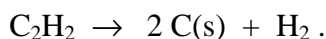
Lindstedt führt zur Rußmodellierung zwei Größen ein, zum einen die sogenannte Partikeldichte  $N$ , die die Partikelanzahl pro Masse Gemisch angibt, und weiterhin den Rußmassenanteil  $Y_S$  [113,114]. Für beide Größen wird eine zusätzliche Bilanzgleichung eingeführt:

$$\frac{\partial \rho N}{\partial t} + \nabla(\rho u N) = \nabla \left( \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla N \right) + S_N \quad (4.80)$$

$$\frac{\partial \rho Y_S}{\partial t} + \nabla(\rho u Y_S) = \nabla \left( \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla Y_S \right) + S_{Y_S} \quad (4.81)$$

Die Bestimmung der Quellterme  $S_N$  und  $S_{Y_S}$  wird im Folgenden beschrieben.

Experimente zeigen, dass Acetylen eine wichtige Rolle in den unterschiedlichen Prozessen der Rußbildung einnimmt ( $\rightarrow$  Kap. 2.6). Aus Acetylenmolekülen können zunächst die PAK aufgebaut werden, später sind sie im HACA-Mechanismus entscheidend am Teilchenwachstum beteiligt. Dementsprechend beschreibt Lindstedt die Keimbildung und das Oberflächenwachstum in Abhängigkeit von der Acetylenkonzentration. Als Reaktion für die Keimbildung formuliert er folgende Gleichung:



In die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante muss einerseits die hohe Aktivierungstemperatur eingehen, andererseits muss berücksichtigt werden, dass die Oberflächen älterer Rußpartikel weniger reaktiv als die der frisch gebildeten Partikel sind. Die Möglichkeit der Einführung eines zusätzlichen Faktors zur Beschreibung der zeitlich abnehmenden Aktivität erscheint Lindstedt als zu komplex und unsicher, daher entscheidet er sich für die nachfolgenden Annahmen.

Experimente belegen, dass das anfängliche Oberflächenwachstum direkt mit der Konzentration von Acetylen in Verbindung gebracht werden kann [115]. Weiterhin werden weniger als 10 % der gesamten Rußmasse durch die Startpartikel gebildet [116]. Als Startpartikel wählt Lindstedt daher sehr kleine Partikel die aus 100 Kohlenstoffatomen bestehen und einen Teilchendurchmesser von  $d_s = 1.24 \text{ nm}$  besitzen. Da die Rußoberfläche zur Berechnung der einzelnen Reaktionsgeschwindigkeiten herangezogen wird, wird mit der Partikelgröße eine entscheidende Größe festgelegt. Variationen der Partikelgröße erzeugen laut Lindstedt allerdings erst dann nennenswerte Änderungen, wenn die Partikelgröße den Bereich  $1 \text{ nm} \leq d_s \leq 10 \text{ nm}$  verlässt. Die Aktivierungstemperatur für die obige Reaktion wählt er mit 21100 K niedriger als andere Autoren, da nur dann die Bildung der Startpartikel und das anfängliche Oberflächenwachstum innerhalb seines Modells geeignet beschrieben werden. Die Reaktionsgeschwindigkeit für die Bildung der Startpartikel ergibt sich dann zu

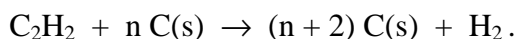
$$R_1 = k_1(T) [\text{C}_2\text{H}_2] \quad (4.82)$$

mit

$$k_1(T) = 0.1 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1} e^{-21100/T}. \quad (4.83)$$

Den Präexponentiellen Faktor bestimmt Lindstedt aus Berechnungen einer Acetylenflamme und dem Vergleich mit Messungen.

Als zweite Reaktion, die zur Zunahme des Rußmassenanteils führt, wird die Anlagerung von Acetylen an die Oberfläche der Rußpartikel formuliert:



Die Reaktionsgeschwindigkeit ist direkt proportional zur Acetylenkonzentration und zur Oberfläche der Rußpartikel:

$$R_2 = k_2(T) f(S) [\text{C}_2\text{H}_2]. \quad (4.84)$$

Die Oberfläche  $S$  aller Rußpartikel wird in  $\text{m}^2/\text{m}^3$  berechnet:

$$S = \pi (d_s^2) (\rho_N). \quad (4.85)$$

Durch Einsetzen des Partikeldurchmessers [113]

$$d_S = \left( \frac{6}{\pi} \frac{1}{\rho_S} \frac{Y_S}{N} \right)^{1/3} \quad (4.86)$$

in Gl. (4.85) ergibt sich die Oberfläche zu

$$S = \pi \left( \frac{6}{\pi} \frac{1}{\rho_S} \frac{Y_S}{N} \right)^{2/3} (\rho N). \quad (4.87)$$

Als Dichte der Rußpartikel wird ein Wert  $\rho_S = 2000 \text{ kg/m}^3$  festgesetzt.

Eine lineare Abhängigkeit der Acetylenanlagerung an die Rußpartikel von deren Oberfläche würde die abnehmende Reaktionsgeschwindigkeit älterer Partikel nicht widerspiegeln und somit zu einem zu hohen Rußmassenanteil führen. Daher führt Lindstedt als simple Vereinfachung ein, dass die aktiven Seiten der Partikel proportional zur Quadratwurzel der gesamten Rußoberfläche seien. Diese Annahme überführt Gl. (4.84) in

$$R_2 = k_2(T) [C_2H_2] \sqrt{\pi \left( \frac{6M_S}{\pi\rho_S} \right)^{2/3}} [C(s)]^{1/3} (\rho N)^{1/6}. \quad (4.88)$$

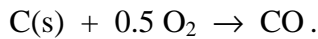
Die molare Masse beträgt  $M_S = 12.011 \text{ g/mol}$  und die Konzentration der Partikel berechnet sich nach

$$[C(s)] = \frac{\rho Y_S}{M_S}. \quad (4.89)$$

In die Geschwindigkeitskonstante der Gl. (4.88) fließen die von Vandsburger [65] bestimmte Aktivierungstemperatur und der von Lindstedt selbst ermittelte Präexponentielle Faktor ein:

$$k_2(T) = 0.6 \cdot 10^4 \text{ m}^{1/2} \text{ s}^{-1} e^{-12100/T}. \quad (4.90)$$

Die Oxidation der Rußpartikel kann prinzipiell mit verschiedenen Ansätzen erfolgen. Während z.B. Fenimore und Jones [70] von einer Oxidation durch OH-Radikale ausgehen, berücksichtigt Liu [117] zusätzlich die Oxidation durch Sauerstoff. Lindstedt hingegen beschreibt die Rußoxidation, wie auch Lee et al. [68] und Nagle und Strickland-Constable [118], ausschließlich durch die Reaktion mit Sauerstoff:



Neben der Sauerstoffkonzentration ist auch für diesen Reaktionsschritt die Rußoberfläche entscheidend

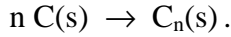
$$R_3 = k_3(T) S [O_2] \quad (4.91)$$

mit

$$k_3(T) = 0.1 \cdot 10^5 \text{ m}^{1/2} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1/2} \sqrt{T} e^{-19680/T}. \quad (4.92)$$



Einen wesentlichen Einfluss auf die Partikeldichte besitzt die Agglomeration bzw. Koagulation der Rußpartikel, sie wird folgendermaßen formuliert:



Für die Reaktionsgeschwindigkeit gilt im Lindstedt-Modell:

$$R_4 = 2C_a d_S^{1/2} \left( \frac{6\kappa T}{\rho_S} \right) (\rho N)^2. \quad (4.93)$$

$\kappa$  ist hier die Boltzmann-Konstante,  $C_a$  eine Agglomerationsrate. Ihr wird ein Wert von  $C_a = 9$  zugewiesen.

Aus den obigen Reaktionen ergibt sich der Quellterm für die Bilanzgleichung der Partikeldichte  $N$  zu:

$$S_N = \frac{2}{C_{\min}} N_A R_1 - k_4(T) [C(s)]^{1/6} (\rho N)^{11/6} \quad (4.94)$$

mit

$$k_4(T) = 2C_a \left( \frac{6M_S}{\pi\rho_S} \right)^{1/6} \left( \frac{6\kappa T}{\rho_S} \right)^{1/2}. \quad (4.95)$$

Die Anzahl der Kohlenstoffatome ist als  $C_{\min} = 100$  definiert (s.o.),  $N_A$  ist die Avogadro-Konstante.

Der Quellterm für die Bilanzgleichung des Rußmassenanteils berechnet sich entsprechend folgender Gleichung:

$$S_{Y_S} = M_S (2R_1 + 2R_2 - R_3) \quad (4.96)$$

Aus dem beschriebenen Reaktionsmechanismus folgt, dass durch die Rußoxidation zwar der Rußmassenanteil abnimmt, die Anzahl der Teilchen bzw. die Partikeldichte jedoch unverändert bleibt. Dies ist vom physikalischen Standpunkt her diskussionswürdig. Diese Vereinfachung liefert jedoch einen gut zu handhabenden Mechanismus, der für die Zwecke dieser Arbeit als ausreichend genau erachtet werden kann.

#### 4.3.4 Wärmestrahlungsmodelle

##### 4.3.4.1 Fotometrische Größen und Strahlungsbilanzgleichung

Während die Wärmeleitung in Festkörpern die einzige Art des Wärmetransportes darstellt, spielt sie in turbulenten Fluiden eine untergeordnete Rolle. Hier dominieren je nach Temperatur entweder die Konvektion oder die Wärmestrahlung. Die unterschiedliche Bedeutung der Wärmestrahlung lässt sich am Stefan-Boltzmann-Gesetz erkennen, nach dem die spezifische Gesamtausstrahlung von der vierten Potenz der Temperatur abhängig ist [85]:

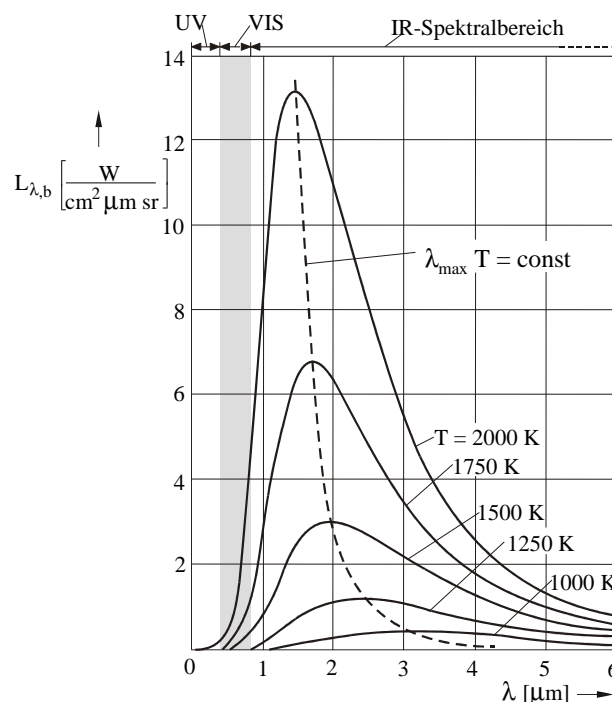
$$M(T) = \sigma T^4 \quad (4.97)$$

Demnach trägt die Strahlung bei relativ niedrigen Temperaturen nur unwesentlich zum Energieaustausch bei, bei hohen Temperaturen hingegen bestimmt sie maßgeblich die Wärmeübertragung. Daher nimmt die Berücksichtigung der Strahlung in den hier simulierten Poolflammen und generell in Verbrennungsprozessen einen entscheidenden Stellenwert ein.

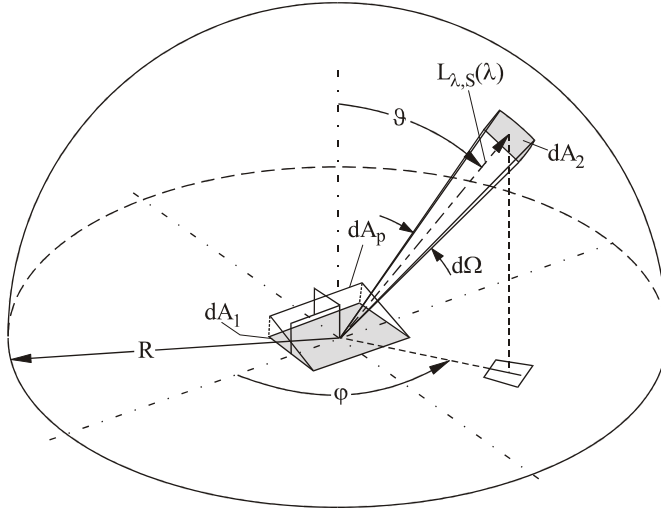
Jede Materie, unabhängig ob gasförmig, flüssig oder fest, emittiert bei jeder Temperatur  $T > 0$  Wärmestrahlung im Wellenlängenbereich von  $0.1 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 100 \mu\text{m}$ . Der sichtbare Wellenlängenbereich macht dabei nur einen geringen Teil der gesamten Energie aus, der größte Teil wird im infraroten Bereich emittiert ( $\rightarrow$  Abb. 4.6).

Beim Auftreffen der ausgesandten Photonen auf Fluide oder Festkörper treten unterschiedliche Effekte auf. Bei der Absorption eines Photons wird seine Energie in das Fluid bzw. den Festkörper überführt. Gase zeigen dabei im Gegensatz zu Festkörpern infolge ihrer unterschiedlichen Energieübergänge diskrete Absorptions- und Emissionsspektren. Die Atome eines Gases weisen elektronisch angeregte, gequantelte Zustände auf, bei Molekülen existieren zusätzlich diskrete Schwingungs- und Rotationszustände. Dementsprechend sind Absorptions- und Emissionsvermögen eines Gases stark wellenlängenabhängig. Im Gegensatz dazu wird i.a. stillschweigend vorausgesetzt, dass die Strahlungsenergie undurchlässiger Körper ausschließlich von der Temperatur und den physikalischen Eigenschaften des Körpers abhängt. Ihr Emissionsspektrum wird als unabhängig von der Wellenlänge der einfallenden Strahlung angenommen. Diese Annahme beruht auf der Tatsache, dass in der Regel die gesamte absorbierte Strahlungsenergie in innere Energie mit einer Gleichgewichtsverteilung umgewandelt wird.

Neben Absorption und Emission kann noch eine Streuung erfolgen. Bekannte Beispiele sind



**Abb. 4.6.** Spektrale Strahldichtevertelung des Schwarzen Strahlers [85].



$$0 \leq \vartheta \leq \pi/2$$

$$0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

$$0 \leq \Omega \leq 4\pi$$

**Abb. 4.7.** Geometrische Verhältnisse zur Definition der Strahldichte [85].

die Streuung z.B. an Partikeln in Staubwolken oder an Flüssigkeitströpfchen in Nebeln. Bei Streuung liegen Zusammenstöße von Photonen mit anderen Teilchen vor, bei denen die Photonen umgelenkt werden. Bei elastischen Stößen bleibt ihre Energie unverändert, bei unelastischen Stößen hingegen wird die Energie in der Regel verringert. Wird bei der Streuung eine Richtung bevorzugt, handelt es sich um eine anisotrope Streuung. Bei einer isotropen Streuung liegt eine gleichmäßige Richtungsverteilung der gestreuten Photonen vor.

Zur Beschreibung der Strahlung sind in der Radiometrie verschiedene Größen definiert. Die Bilanzierung der Strahlung erfolgt in der Regel anhand der Strahldichte  $L$ . Sie ist definiert als der Strahlungsfluss  $\phi_{\text{Rad}}$ , der in einem differentiellen Wellenlängenbereich  $d\lambda$  von dem senkrecht zur  $\vartheta, \varphi$ -Richtung projizierten, strahlenden Flächenelement  $dA_p = dA_1 \cos \vartheta$  in den Raumwinkel  $d\Omega$  emittiert wird [85]:

$$L(r, s, \lambda) = \frac{d^3 \phi_{\text{Rad}}}{dA_1 \cos \vartheta d\Omega d\lambda} = \frac{dI(\lambda)}{dA_1 \cos \vartheta} . \quad (4.98)$$

$I$  bezeichnet hier die Strahlstärke, die geometrischen Verhältnisse sind in Abb. 4.7 verdeutlicht. Der Strahlungsfluss  $\phi_{\text{Rad}}$  ist wiederum definiert als

$$\phi_{\text{Rad}} = \frac{dQ}{dt} , \quad (4.99)$$

mit der von den Photonen transportierten Strahlungsenergie  $Q$ .

Das Produkt aus der absoluten Temperatur eines schwarzen Körpers  $T$  und der Wellenlänge maximaler Strahldichte  $\lambda_{\text{max}}$  ist konstant, es gilt das Wiensche Verschiebungsgesetz [85]:

$$\lambda_{\text{max}} T = \frac{C_2}{4.97} = 2.898 \cdot 10^{-3} \text{ m K} . \quad (4.100)$$

Die Bilanzgleichung für die Strahldichte lautet unter Berücksichtigung der möglichen Effekte [85,95]:

$$\frac{dL_\lambda(r, \vec{s})}{d\ell} = - (k_{\text{abs}, \lambda} + k_{\text{str}, \lambda}) L_\lambda(r, \vec{s}) + k_{\text{abs}, \lambda} L_{S, \lambda}(r, \vec{s}, T) \quad (4.101)$$

$$\begin{aligned}
& \text{(a)} & \text{(b)} \\
& + \frac{k_{\text{str},\lambda}}{4\pi} \int dL_{\lambda}(r,s) \psi(\vec{s},\vec{s}',\Omega) d\Omega + S_{L_{\lambda}} \\
& \text{(c)} & \text{(d)}
\end{aligned}$$

Demnach ist die Änderung der spektralen Strahldichte entlang des Strahlweges  $\ell$  am Ort  $r$  in Richtung  $\vec{s}$  gleich der Abschwächung durch Absorption und Streuung (Term (a)) mit den Koeffizienten  $k_{\text{abs}}$  und  $k_{\text{str}}$ , der Intensitätserhöhung durch die in Richtung  $\vec{s}$  emittierte und mit dem Koeffizienten  $k_{\text{abs}}$  gewichtete Schwarzkörperstrahlung  $L_s(r, \vec{s}, T)$  (Term (b)), und durch die aus allen übrigen Richtungen  $\vec{s}'$  eingestreuete Strahlung (Term (c)). Die Funktion  $\psi(\vec{s}, \vec{s}', \Omega)$  steht dabei für die Wahrscheinlichkeit, dass der Strahl  $\vec{s}'$  an der Strahldicke  $d\Omega$  eine Verstärkung in Richtung  $\vec{s}$  bewirkt. Weiterhin können noch zusätzliche Wärmequellen (Term (d)) berücksichtigt werden.

Die hier modellierten Poolflammen zeichnen sich durch hohe Temperaturen und eine sehr hohe Rußpartikelkonzentration aus. Der überwiegende Teil der Strahlung wird von heißen Rußpartikeln emittiert. Daher kann als gute Näherung angenommen werden, dass es sich bei dem Gas/Rußpartikel-Gemisch um ein graues Medium handelt. Durch die Annahme, dass die Strahlungsintensität über alle Wellenlängen  $\lambda$  gleichmäßig verteilt ist, kann die rechenintensive Berücksichtigung der einzelnen Banden der vorhandenen Gasspezies entfallen.

Neben der Strahldichte werden häufig noch zwei weitere Größen verwendet. Die hemisphärische spektrale, spezifische Ausstrahlung SEP ist der Strahlungsfluss, der in einem differentiellen Wellenlängenbereich  $d\lambda$  von einem Flächenelement  $dA_1$ , integriert über alle Raumwinkel  $2\pi\Omega_0$  des Halbraums, emittiert wird:

$$\text{SEP}(r, \vec{s}, \lambda) = \frac{d^2 \phi_{\text{rad}}}{dA_1 d\lambda} . \quad (4.102)$$

Die Bestrahlungsstärke  $E$  bezieht sich im Gegensatz zur Strahldichte und der spezifischen Ausstrahlung nicht auf die strahlende bzw. sendende Fläche, sondern auf ein Empfängerflächenelement. Die spektrale Bestrahlungsstärke ist definiert als:

$$E(r, \lambda) = \frac{d^2 \phi_{\text{Rad}}}{dA_2 d\lambda} . \quad (4.103)$$

#### 4.3.4.2 Strahlungsmodellierung mit der Monte-Carlo Methode

Der Name Monte-Carlo Methode wurde der Stadt, die nicht zuletzt durch das vom Zufall bestimmte Glücksspiel bekannt wurde, entliehen und deutet bereits auf das Prinzip dieser Methode hin. Mit Monte-Carlo Methoden werden Berechnungsmethoden bezeichnet, die unter Zuhilfenahme von Zufallszahlen erfolgen. Zur Anwendung kommen Monte-Carlo Simulationen bei vielen unterschiedlichen Problemstellungen, wie beispielsweise in der Meteorologie zur Prognose von Klimaveränderungen oder auch in der Finanzwirtschaft zur Vorhersage von Börsenkursen. Zur Berechnung der Wärmeübertragung durch Strahlung stellt die Monte-Carlo Methode eine der robustesten numerischen Methoden dar. Ihr Vorteil liegt in der Möglichkeit, Wärmestrahlungsübertragungen in beliebigen geometrischen Konfigurationen unter

Berücksichtigung von räumlich stark variierenden optischen Eigenschaften eines durchstrahlten Mediums auf eine einfache Weise zu simulieren. Dabei werden einzelne stochastische Ereignisse in großer Anzahl simuliert und statistisch interpretiert.

Bei der hier verwendeten Monte-Carlo Methode wird eine repräsentative Anzahl von Photonen im gesamten Simulationsgebiet ausgesendet. Die Ausgangspunkte und Anfangsrichtungen der einzelnen Photonen werden dabei zufällig gewählt. Daher muss gewährleistet sein, dass eine genügend große Anzahl von Photonen verfolgt wird, um eine realistische Abbildung der Strahlung zu ermöglichen. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Photon an einem bestimmten Ort bzw. in einer bestimmten Zelle entlang seines Strahlweges absorbiert bzw. gestreut wird, wird durch die räumlich variablen Absorptionskoeffizienten  $k_{\text{abs}}$  bzw.  $k_{\text{str}}$  bestimmt. Die Bestrahlungsstärke  $E$  an einer bestimmten Fläche, ist gleich der Anzahl der gezählten, auf sie getroffenen Photonen multipliziert mit der zugehörigen Emissivität [95].

Der entscheidende Nachteil der Monte-Carlo Methode besteht darin, dass sie sehr rechenintensiv ist, wenn eine gute Genauigkeit der Resultate erwünscht ist. Das trifft insbesondere dann zu, wenn die Monte-Carlo Methode wie im Rahmen dieser Arbeit mit anderen Methoden wie finite Differenzen oder finite Volumen gekoppelt wird. Durch die Vielzahl der Zellen fällt die Anzahl der benötigten Rechenschritte entsprechend hoch aus. Auch die Stabilität von Zeitintegrationsschemata im Falle von instationären Problemen wird stark durch die Genauigkeit der Resultate einer Monte-Carlo Simulation beeinflusst.

Die räumlich und zeitlich stark variierenden Temperaturen und Spezieskonzentrationen in Poolflammen bewirken ein ebenso variables Emissions- bzw. Absorptionsvermögen. Da die Berücksichtigung dieser Schwankungen mit der Monte-Carlo Methode jedoch keine Probleme darstellt, wurde sie in den Simulationen trotz des erhöhten Rechenaufwandes bevorzugt eingesetzt.

#### 4.3.4.3 Strahlungsmodellierung mit der Diskreten Transfermethode

Neben Monte-Carlo Simulationen hat sich auch die Diskrete Transfermethode bei der Strahlungsmodellierung in Poolflammen durchgesetzt. Hier wird die Strahldichte  $L$  nicht durch das Verfolgen einer sehr hohen Anzahl von Photonen ermittelt, sondern entlang weniger fester Strahlen berechnet. Dadurch lässt sich die Rechenzeit gegenüber der Monte-Carlo Methode deutlich verkürzen. Dazu sind jedoch Vereinfachungen notwendig, die unter Umständen das Ergebnis verfälschen können. Die Diskrete Transfermethode geht von einer isotropen Streuung aus. Gl. (4.101) vereinfacht sich dadurch zu [95]

$$\begin{aligned} \frac{dL_{\lambda}(r, \vec{s})}{d\ell} = & - (k_{\text{abs},\lambda} + k_{\text{str},\lambda}) L_{\lambda}(r, \vec{s}) + k_{\text{abs},\lambda} L_{S,\lambda}(r, \vec{s}, T) \\ & + \frac{k_{\text{str},\lambda}}{4\pi} \int_{\Omega=4\pi} dL_{\lambda}(r, \vec{s}') d\Omega + S_{L_{\lambda}}. \end{aligned} \quad (4.104)$$

Weiterhin wird angenommen, dass das Bilanzgebiet relativ homogene Strahlungseigenschaften aufweist, so dass gilt [95]:

$$L_{\lambda}(r) \sim L_{\lambda}(r + dr). \quad (4.105)$$

Die Intensität wird dann entlang Strahlen, die mit  $L_{\lambda,0}$  von den Rändern des Bilanzgebietes ausgehen, anhand folgender Gleichung berechnet [95]:

$$L_{\lambda}(r, \vec{s}) = L_{\lambda,0} \exp\left(-\left(k_{\text{abs},\lambda} + k_{\text{str},\lambda}\right)\ell\right) + L_{S,\lambda} \left(1 - \exp\left(-k_{\text{abs},\lambda} \ell\right)\right) + k_{\text{str},\lambda} \bar{L}_{\lambda} . \quad (4.106)$$

Üblicherweise werden 8-16 Strahlen im Bilanzgebiet verfolgt. Die Ausweitung der Ergebnisse entlang der Strahlwege auf das gesamte Bilanzgebiet erfolgt unter der oben genannten Annahme der Homogenität des Gebietes. Im Falle eines grauen Mediums werden die Intensitäten nur einmal pro Strahl berechnet. Sollen jedoch beispielsweise verschiedene Banden eines Gases berücksichtigt werden, muss die Lösung zunächst für jede entsprechende Wellenlänge berechnet werden. Abschließend erfolgt dann eine Integration über die einzelnen Ergebnisse zur Ermittlung der Gesamtintensität.

## 4.4 Diskretisierungs- und numerische Lösungsverfahren

### 4.4.1 Finite Volumen Methoden

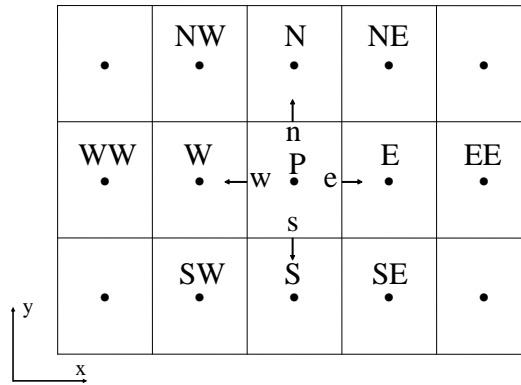
Unter dem Begriff der Diskretisierung versteht man in der Numerik die Überführung einer kontinuierlichen Funktion in eine Funktion, die nur an endlich vielen Punkten betrachtet wird. Da die in den vorangegangenen Kapiteln besprochenen Bilanzgleichungen nicht analytisch gelöst werden können, müssen die Differentialquotienten durch eine Diskretisierung in Differenzquotienten überführt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wird die sehr weit verbreitete Methode der finiten Volumen angewandt, d.h. das Bilanzgebiet wird in eine möglichst hohe Anzahl an Kontrollvolumina unterteilt. Dadurch entsteht ein Rechengitter mit diskreten Stützstellen. Ein Ausschnitt eines zweidimensionalen Gitters bzw. Netzes ist in Abb. 4.8 dargestellt. Es handelt sich hier um ein versetztes Gitter, d.h. dass nicht alle Größen an denselben Gitterpunkten liegen. Die vektoriellen Größen wie beispielsweise die Strömungsgeschwindigkeiten werden an den Zellkanten betrachtet, die skalaren Größen wie z.B. der Druck werden an den Zellmittelpunkten gespeichert. Versetzte Gitter werden häufig aus numerischen Stabilitätsgründen angewandt.

Die Differentialgleichungen werden numerisch nur noch an den diskreten Punkten betrachtet. Entsprechend der Definition der Ableitung einer differenzierbaren Funktion

$$\frac{d\phi}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\phi_{x+\Delta x} - \phi_x}{\Delta x} \quad (4.107)$$

wird der Differentialoperator am Gitterpunkt P durch einen Differenzoperator approximiert [88]:

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_P = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} . \quad (4.108)$$



**Abb. 4.8.** Notation in einem versetzten zweidimensionalen numerischen Gitter. Die Abkürzungen N, E, S, und W geben die jeweilige Lage north, east, south und west im Bezug auf den Punkt P an. Außerdem sind die Flüsse n, e, s und w in die benachbarten Zellen dargestellt.

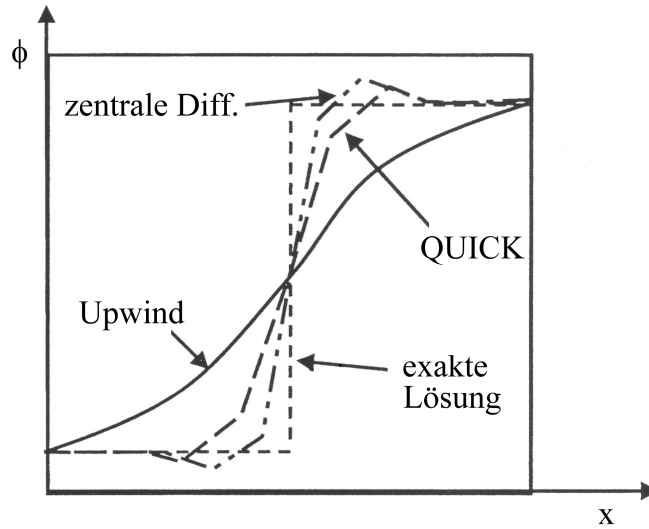
In diesem Fall wurde die sogenannte rechtsseitige Differenz gewählt, ebenso ist eine linksseitige Differenz mit dem westlichen Nachbarn möglich [88]

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_P = \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x}, \quad (4.109)$$

oder auch eine zentrale Differenz [88]

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_P = \frac{\phi_E - \phi_W}{2\Delta x}. \quad (4.110)$$

Die zentrale Differenz ist von quadratischer Fehlerordnung  $O(1/(\Delta x)^2)$ , d.h. bei einer Halbierung der Schrittweite wird der Diskretisierungsfehler etwa um den Faktor vier verringert. Dagegen ist der Diskretisierungsfehler bei den links- und rechtsseitigen Differenzen von der Größenordnung  $O(1/\Delta x)$ , d.h. bei einer Halbierung der Schrittweite wird der Diskretisierungsfehler in etwa halbiert. Trotz der günstigeren Fehlerordnung ist die zentrale Differenz nicht für alle Problemstellungen gleich gut geeignet. Bei Konvektions-Diffusions-Problemen, in denen der Konvektionsterm dominiert, kommt es häufig zu unphysikalischen Oszillationen bzw. zum Überschwingen der numerischen Lösung ( $\rightarrow$  Abb. 4.9) wenn die Gitterweiten nicht klein genug gewählt werden können. In solchen Fällen werden oftmals einseitige Differenzen vorgezogen, wobei die Strömungsrichtung berücksichtigt werden muss. Erfolgt die Strömung in dem Beispielgitter in Abb. 4.8 von Westen nach Osten so muss die Berechnung mit der linksseitigen Differenz erfolgen, bei einer umgekehrt gerichteten Strömung mit der rechtsseitigen Differenz. Wegen der Abhängigkeit von der Strömungsrichtung wird diese Methode als Upwind Diskretisierung bezeichnet. Die Upwind Diskretisierung 1.Ordnung hat den Nachteil, dass durch sie zum Teil unrealistische, numerische Diffusionseffekte eingeführt werden ( $\rightarrow$  Abb. 4.9). Dennoch hat sie sich durch ihre numerische Stabilität in vielen turbulenten Strömungen bewährt, und wird daher für die Lösung der Gleichungen des k- $\epsilon$  Turbulenzmodells verwendet. Es existieren generell Upwind Diskretisierungen höherer Ordnungen, diese stehen im Löser CFX allerdings nicht zur Verfügung. In Abb. 4.9 ist als weiteres Beispiel für eine



**Abb. 4.9.** Mit verschiedenen Diskretisierungsmethoden berechnete Lösungen nach Menter [119]. Während mit dem Upwind Verfahren erster Ordnung eine numerische Diffusion eingeführt wird, können Verfahren höherer Ordnung zum Überschwingen der Lösung führen.

Diskretisierung höherer Ordnung eine mit der Quick Methode (Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics [119]) berechnete Kurve dargestellt. Die Quick Methode ist eine Kombination aus der zentralen Diskretisierung und einer Upwind Diskretisierung 2. Ordnung und stellt einen Kompromiss aus den beiden Methoden dar. Die numerische Diffusion ist deutlich geringer als bei der Upwind Diskretisierung 1. Ordnung, jedoch etwas höher als bei der Verwendung zentraler Differenzen. Ähnlich wie bei den zentralen Differenzen tritt auch hier das Überschwingen auf, allerdings in geringerem Maße als bei den zentralen Differenzen.

Im Rahmen dieser Arbeit wird für die Diskretisierung in die drei Raumrichtungen aller Gleichungen außer die der Turbulenz eine sogenannte High-Resolution Methode verwendet. Für den Wert  $\phi_P$  am Punkt P gilt [95]

$$\phi_P = \phi_{UP} + \beta \nabla \phi \Delta \vec{v}, \quad (4.111)$$

mit dem Wert  $\phi_{UP}$  am Upwind-Punkt und dem Vektor  $\vec{v}$ , der von der Upwind-Stützstelle zum Punkt P zeigt. Der Faktor  $\beta$  liegt im Bereich von null bis eins. Für Werte  $0 < \beta < 1$  ist  $\nabla \phi$  gleich dem Durchschnitt der benachbarten Gradienten, im Fall für  $\beta = 1$  gleich der Gradienten des Upwind-Punktes. Somit bestimmt  $\beta$ , ob eine Methode erster oder zweiter Ordnung angewandt wird. In Bereichen, in denen die betrachtete Größe nur relativ geringe Gradienten aufweist, wird  $\beta$  so nah wie möglich an 1 approximiert, in Bereichen hoher Schwankungen hingegen tendiert er gegen null. Auf diese Art werden die Vorteile der Genauigkeit von Methoden zweiter Ordnung mit der numerischen Stabilität der Upwind Methode kombiniert.



#### 4.4.2 Gekoppelter Löser und Mehrgitterverfahren

Die Anwendung der Finiten Volumen Methode auf alle Elemente im Bilanzgebiet führt zu einem linearen Satz von diskreten Bilanzgleichungen in der Form

$$\sum_{nb_i} a_i^{nb} \phi_i = b_i, \quad (4.112)$$

mit der Nummer  $i$  des Kontrollvolumens bzw. des Knotenpunktes  $P$ , der Lösung  $\phi$ , den Koeffizienten  $a$  der Gleichung, der rechten Seite  $b$  und den zu berücksichtigen Nachbarn  $nb$  von  $i$ . Für eine skalare Größe sind alle  $a_i^{nb}$ ,  $\phi_{nb}$  und  $b_i$  eine Zahl, für den gekoppelten Satz der Bilanzgleichungen für Masse und Impuls bilden sie jedoch eine Matrix bzw. einen Vektor [95]:

$$a_i^{nb} = \begin{bmatrix} a_{u_x u_x} & a_{u_x u_y} & a_{u_x u_z} & a_{u_x p} \\ a_{u_y u_x} & a_{u_y u_y} & a_{u_y u_z} & a_{u_y p} \\ a_{u_z u_x} & a_{u_z u_y} & a_{u_z u_z} & a_{u_z p} \\ a_{p u_x} & a_{p u_y} & a_{p u_z} & a_{p p} \end{bmatrix}_i^{nb}, \quad (4.113)$$

$$\phi_i = \begin{bmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \\ p \end{bmatrix}_i, \quad (4.114)$$

$$b_i = \begin{bmatrix} b_{u_x} \\ b_{u_y} \\ b_{u_z} \\ b_p \end{bmatrix}_i. \quad (4.115)$$

Der Löser von CFX (ab Version 5.0) behält die Kopplung der Gleichungen bei, alle Reihen werden mit denselben Lösungsmethoden berechnet. Der Vorteil in dieser Methode gegenüber den nicht-gekoppelten oder auch iterativ genannten Lösern liegt in seiner Stabilität und seiner Einfachheit [95], als Nachteil entsteht ein höherer Speicherbedarf.

Die generelle Lösungsstrategie ist in Abb. 4.10 verdeutlicht. Es entstehen für jeden Zeitschritt zwei rechenintensive Operationen. Zunächst müssen die nicht-linearen Gleichungen linearisiert werden um die Koeffizienten für die Lösungsmatrix zu finden. Danach werden die linearen Gleichungen mit Hilfe eines algebraischen Mehrgitterverfahrens gelöst. Im stationären Fall werden die Iterationen über die Zeitschrittweite kontrolliert, um die Lösung anzunähern. In transienten Berechnungen werden vom Anwender neben der Zeitschrittweite noch die Anzahl der maximalen Iterationen pro Zeitschritt festgelegt. Bei der dargestellten Lösungsstrategie handelt es sich also um eine iterative Methode, bei der die exakte Lösung durch wiederholte Rechenschritte angenähert wird. CFX verwendet zur Lösung des diskreten Systems linearer Gleichungen ab der Version 5.0 einen durch ein Mehrgitterverfahren beschleunigten ILU (incomplete lower upper) Solver.

Das lineare System diskreter Gleichungen kann unter Berücksichtigung der Koeffizientenmatrix  $[A]$  und dem Lösungsvektor  $[\phi]$  folgendermaßen formuliert werden [95]:

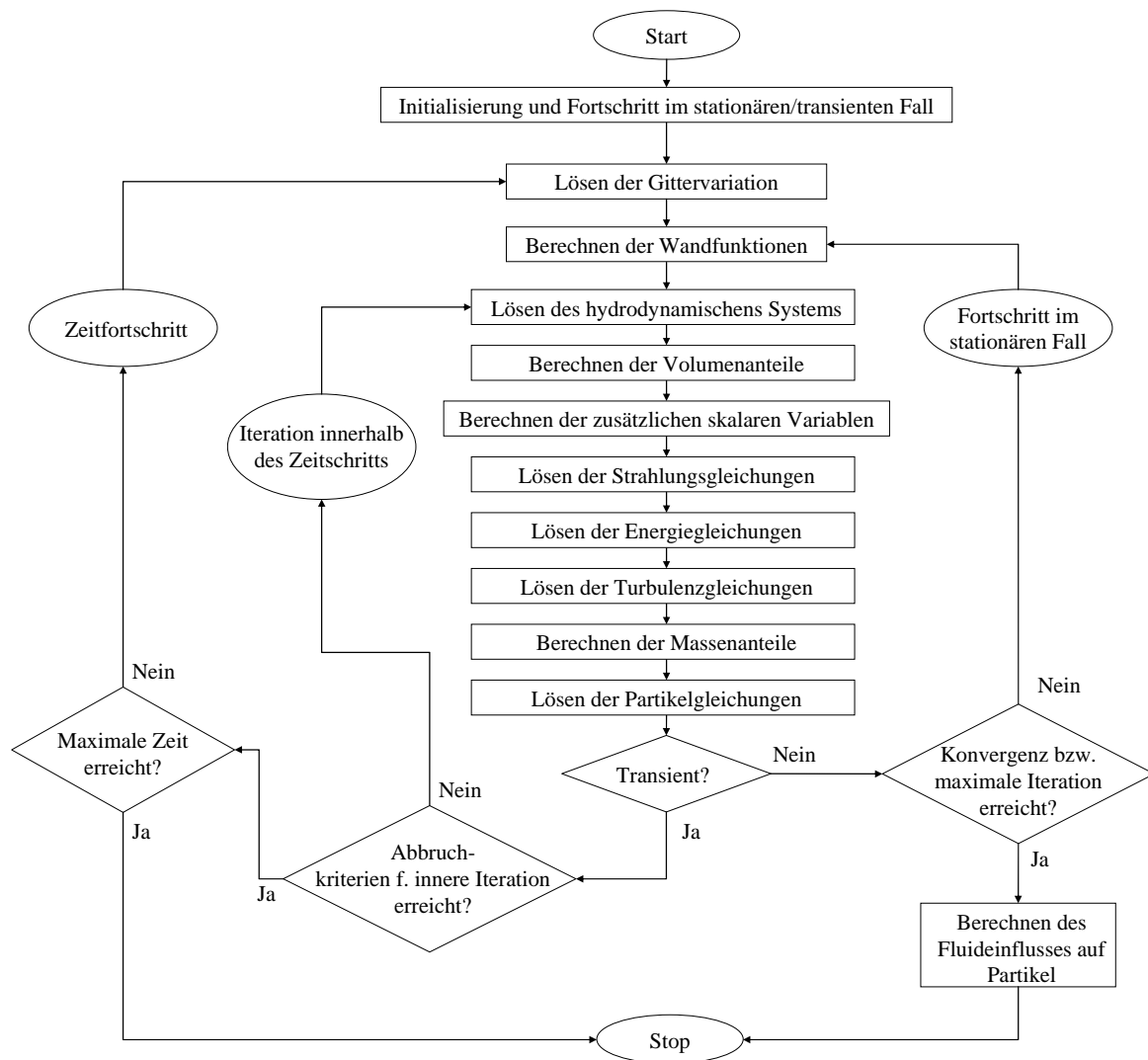


Abb. 4.10. Lösungsstrategie des gekoppelten CFX-Lösers [95].

$$[A][\phi] = [b]. \quad (4.116)$$

Bei einer iterativen Methode wird von einer ungefähren Lösung ausgegangen, die durch einen Korrekturwert zu einem neuen Wert verbessert wird [95]:

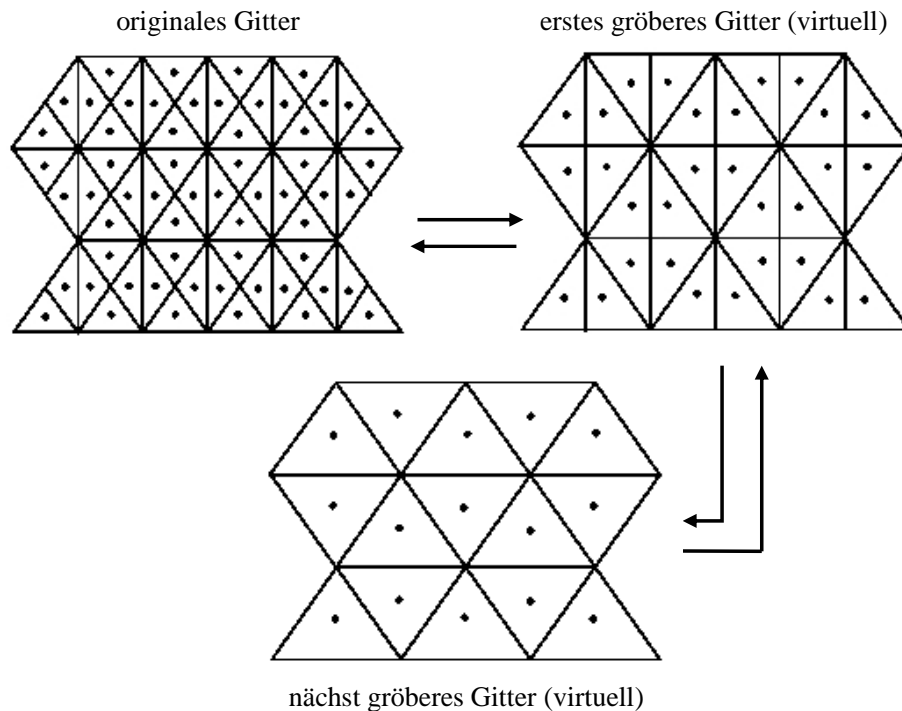
$$\phi_{n+1} = \phi_n + \phi'. \quad (4.117)$$

Der Korrekturwert ist die Lösung der Gleichung [95]

$$A\phi' = r_n, \quad (4.118)$$

und  $r_n$  das Residuum aus

$$r_n = b - A\phi_n. \quad (4.119)$$



**Abb. 4.11.** Mehrgitterverfahren: Die Generierung gröberer Gitter erscheint als virtuelle Verschmelzung einzelner Zellen [95].

Die Rechenschritte werden solange wiederholt, bis das Residuum einen gewünschten Grenzwert unterschreitet. Iterative Solver haben verschiedene Nachteile. Ihre Genauigkeit sinkt schnell bei zunehmend unterschiedlichen Kantenlängen der Kontrollvolumina. Außerdem werden nur Fehler bzw. Störungen schnell herausgefiltert, deren Wellenlänge im Bereich der Zellenweiten liegen. Fehler größerer Wellenlängen brauchen in der Regel sehr lange, bis sie aus der Lösung verschwinden. Diese Problematik lässt sich ausschalten, indem die Berechnungen auf mehreren Gittern mit verschiedenen Gitterweiten durchgeführt werden. In zunehmend gröberen Gittern erscheinen selbst die ursprünglich langwelligen Störungen als relativ klein und werden schnell herausgefiltert.

Um dem Anwender ein mehrfaches Vernetzen der Geometrie zu ersparen, wird das System diskreter Gleichungen für ein gröberes Gitter durch Summierung der Gleichungen des feineren Gitters erstellt. Das Ergebnis ist ein schrittweises, virtuelles Vergrößern des Gitters ( $\rightarrow$  Abb. 4.11). Der erhöhte numerische Aufwand durch das Rechnen auf mehreren Gittern wird durch das schnellere Filtern der langwelligen Fehler mehr als aufgewogen. Durch das algebraische Mehrgitterverfahren kann die Anzahl der zur Konvergenz benötigten Iterationen teilweise drastisch reduziert werden. Der rechenintensive Prozess der Diskretisierung der nicht-linearen Gleichungen muss lediglich auf dem feinsten Gitter durchgeführt werden.



# 5 Durchführung der Simulationen

## 5.1 Übersicht

Im Rahmen dieser Arbeit werden vier modellierte Poolflammen dargestellt. Die ersten drei Flammen werden mit dem Brennstoff Kerosin unter Verwendung identischer Submodelle modelliert. Es wird jedoch der Pooldurchmesser variiert, um zu zeigen, dass die experimentell gefundene Abhängigkeit verschiedener Größen wie Temperatur und Strömungsgeschwindigkeit von diesem Parameter auch in den Berechnungen realistisch wiedergegeben wird. In der vierten Poolflamme wird n-Heptan als Brennstoff definiert. Die Rußverteilung wird mit dem aufwendigeren Lindstedt-Rußmodell berechnet. Da es Acetylen als Keimbildner betrachtet, muss das komplexere und rechenintensivere Flamelet-Verbrennungsmodell, das die Berechnung der Massenanteile zahlreicher Spezies ermöglicht, verwendet werden. Eine Übersicht der durchgeführten Simulationen und der eingesetzten Submodelle findet sich in Tab. 5.1. Die Bezeichnung der Modellierungen setzt sich aus dem Anfangsbuchstaben des Brennstoffs und dem Pooldurchmesser in Metern zusammen. Die Erläuterungen zur Geometrieerstellung, Gittergenerierung, Auswahl und Konfiguration der Submodelle sowie die Definition der Anfangs- und Randbedingungen erfolgen in den nachfolgenden Kapiteln.

**Tab. 5.1.** Übersicht der durchgeführten Modellierungen.

	K10	K16	K20	H6
Geometrie	3D-Spiegel-symmetrie	2D-Rotations-symmetrie	3D-Spiegel-symmetrie	3D-Spiegel-symmetrie
Pooldurchmesser	10 m	16 m	20 m	6 m
Brennstoff	Kerosin	Kerosin	Kerosin	n-Heptan
Verbrennungsmodell	Eddy-Dissipation	Eddy-Dissipation	Eddy-Dissipation	Flamelet
Rußmodell	Magnussen	Magnussen	Magnussen	Lindstedt
Turbulenzmodell	Standard k-ε Modell	Standard k-ε Modell	Standard k-ε Modell	Standard k-ε Modell
Wärmestrahlungsmodell	Monte Carlo Methode	Monte Carlo Methode	Monte Carlo Methode	Monte Carlo Methode
Zeitintervall	$0 \leq t \leq 30 \text{ s}$	$0 \leq t \leq 69.4 \text{ s}$	$0 \leq t \leq 50 \text{ s}$	$0 \leq t \leq 30 \text{ s}$

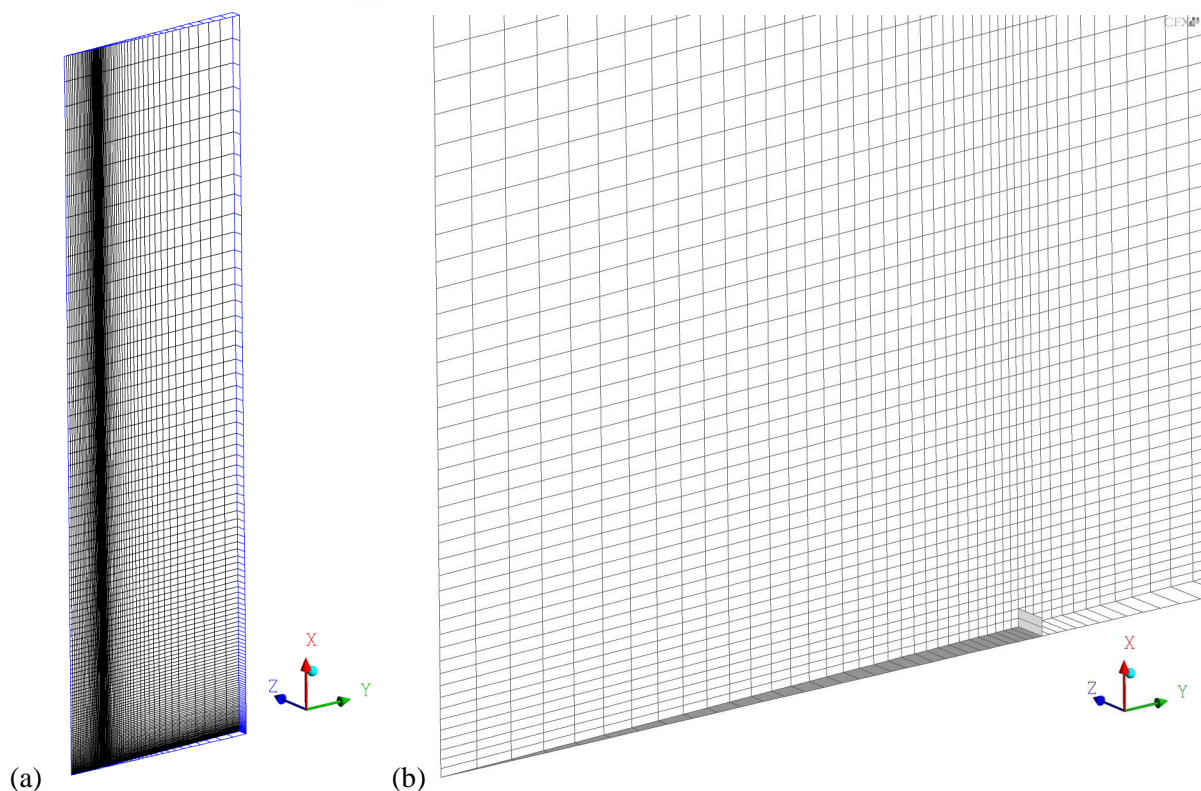
## 5.2 Erstellung der Geometrie und Gittergenerierung mit ICEM CFD

Für die vier Modellierungen werden unterschiedliche Geometrien und Rechengitter erstellt. Die Modellierung der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 16$  m erfolgt in einem rotationssymmetrischen Gitter. In den Modellierungen der beiden anderen Kerosinflammen mit  $d = 10$  m bzw.  $d = 20$  m und der Heptan-Poolflamme mit  $d = 6$  m wird anstelle der Rotationssymmetrie eine Spiegelsymmetrie eingeführt. Die Definition vereinfachter Geometrien führt zu einer deutlichen Reduzierung der Rechenzeit. Im Folgenden werden die vier Geometrien detailliert beschrieben.

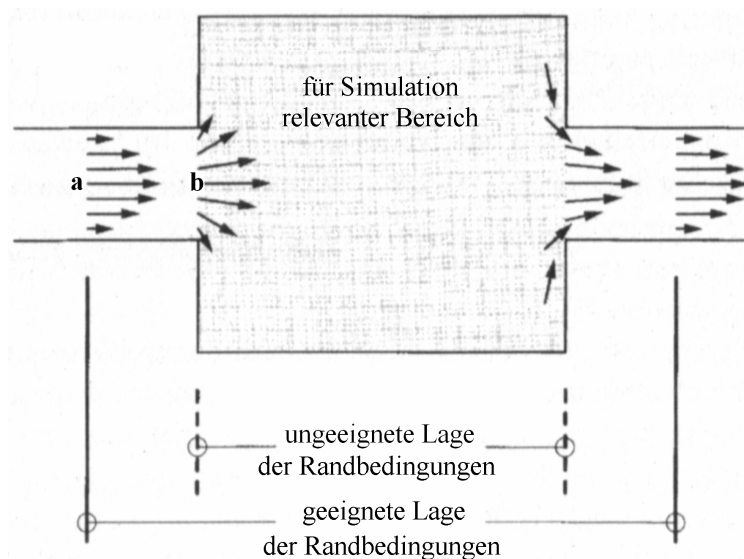
### 5.2.1 Geometrie und Gitter für die Kerosin-Poolflamme mit $d = 16$ m

Die Modellierung der Kerosin-Poolflamme mit einem Pooldurchmesser von  $d = 16$  m erfolgt unter Annahme einer Rotationssymmetrie. Formal entfällt somit die dritte Dimension der Geometrie, wodurch sich die Rechenzeit erheblich verkürzt. Da CFX keinen reinen zweidimensionalen Löser besitzt, muss in der dritten Dimension zumindest eine Zelle definiert werden. Die Geometrie wird daher als rotationssymmetrisch definiert mit einem Winkel von  $3^\circ$  um die Rotationsachse  $x$ . Dadurch entstehen direkt an der  $x$ -Achse keilförmige Zellen ( $\rightarrow$  Abb. 5.1b), der Rest des Gitters wird mit hexaedrischen Zellen aufgefüllt.

Die Abmessungen der Geometrie betragen 140 m in  $x$ -Richtung (axial) und 40 m in  $y$ -Richtung (radial), der Koordinatenursprung liegt in der Poolmitte. Dabei wird das Gitter vor allem am Poolrand verfeinert ( $\rightarrow$  Abb. 5.1b), die kleinsten Zellen besitzen hier eine Kantenlänge von 0.1 m. Das Gitter besteht insgesamt aus 7548 hexaedrischen Zellen und 111 keil-



**Abb. 5.1.** Gitter zur Modellierung einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 16$  m: (a) Gitter in der  $xy$ -Ebene, die Ausdehnung in  $z$ -Richtung ist nur in den Grenzflächen blau eingezeichnet; (b) Ausschnitt des Gitters in Poolnähe. Die Pooloberfläche ist zur Verdeutlichung grau eingefärbt.



**Abb. 5.2.** Zur Wahl der Lage von Randbedingungen [93].

förmigen Zellen ( $\rightarrow$  Abb. 5.1a). Diese relativ kleine Anzahl von Zellen ermöglicht die Durchführung der Berechnungen auf einem einzigen Prozessor, während die nachfolgenden dreidimensionalen Modellierungen die Nutzung mehrerer Prozessoren erfordern.

Da die Randbedingungen einer Simulation einen deutlichen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse ausüben können, muss ihre Lage so gewählt werden, dass sie möglichst genau abgeschätzt werden können. Abb. 5.2 zeigt beispielhaft mehr oder weniger geeignete Lagen für Randbedingungen, in diesem Fall für Einlass und Auslass eines Bilanzgebietes. Während sich entlang eines Kanalquerschnitts am Punkt a die Geschwindigkeiten eindeutig definieren lassen, ist die Geschwindigkeitsverteilung an der Kanalaufweitung nach dem Punkt b nicht eindeutig abschätzbar. In den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen erfolgt am Pool eine ähnliche Querschnittserweiterung, sodass die Geschwindigkeitsverteilung der aufsteigenden Brennstoffgase ähnlich schwer abschätzbar ist. Daher wird, auch nach dem Vergleich mit Publikationen ähnlicher Problemstellungen [10,11], eine kleine Wand am Poolrand definiert. Diese Poolwand stellt bei einer genügend kleinen Höhe keinen Widerspruch zu den Experimenten dar, da die Flüssigkeitsoberfläche in der Regel nicht exakt auf dem Niveau des Erdbodens liegt ( $\rightarrow$  Abb. 3.2). Die aufsteigenden Brennstoffdämpfe werden in der Modellierung durch die Poolwand und im Experiment durch den Höhenunterschied zwischen Brennstoffoberfläche und dem Poolrand zunächst in die vertikale Richtung gelenkt. Es wird für alle drei Modellierungen von Kerosin-Poolflammen eine infinit dünne Poolwand mit einer Höhe von 2.5 % des Pooldurchmessers eingeführt. In der Modellierung der rotationssymmetrischen Kerosinflamme beträgt die Höhe der Poolwand also  $H_{\text{rim}} = 0.4 \text{ m}$ .

### 5.2.2 Geometrie und Gitter für die Kerosin-Poolflammen bei Annahme einer Spiegelsymmetrie

Für die beiden Modellierungen der Kerosin-Poolflammen mit  $d = 20 \text{ m}$  bzw.  $d = 10 \text{ m}$  wurde jeweils eine Geometrie bzw. ein Gitter mit einer Spiegelebene definiert. Dadurch werden im Gegensatz zur rotationssymmetrischen Modellierung K16 nun auch die Strömungen in der

dritten Dimension berücksichtigt. Die Vernetzung in drei Dimensionen bei Einführung einer Spiegelebene bewirkt allerdings auch eine erhebliche Steigerung der Zellenanzahl auf 520756 für  $d = 10$  m und 559136 für  $d = 20$  m. Dies führt zu einer vollständigen Auslastung der zur Verfügung stehenden 8 Prozessoren. Als Richtgröße gibt der Hersteller Ansys eine Zellenanzahl von 50000 bis 75000 pro Prozessor an. Eine Modellierung der vollen Geometrie mit den gewählten Diskretisierungen würde also entweder bei gleicher Rechenzeit mehr Prozessoren erfordern oder zu einer Verdoppelung der Rechenzeit führen.

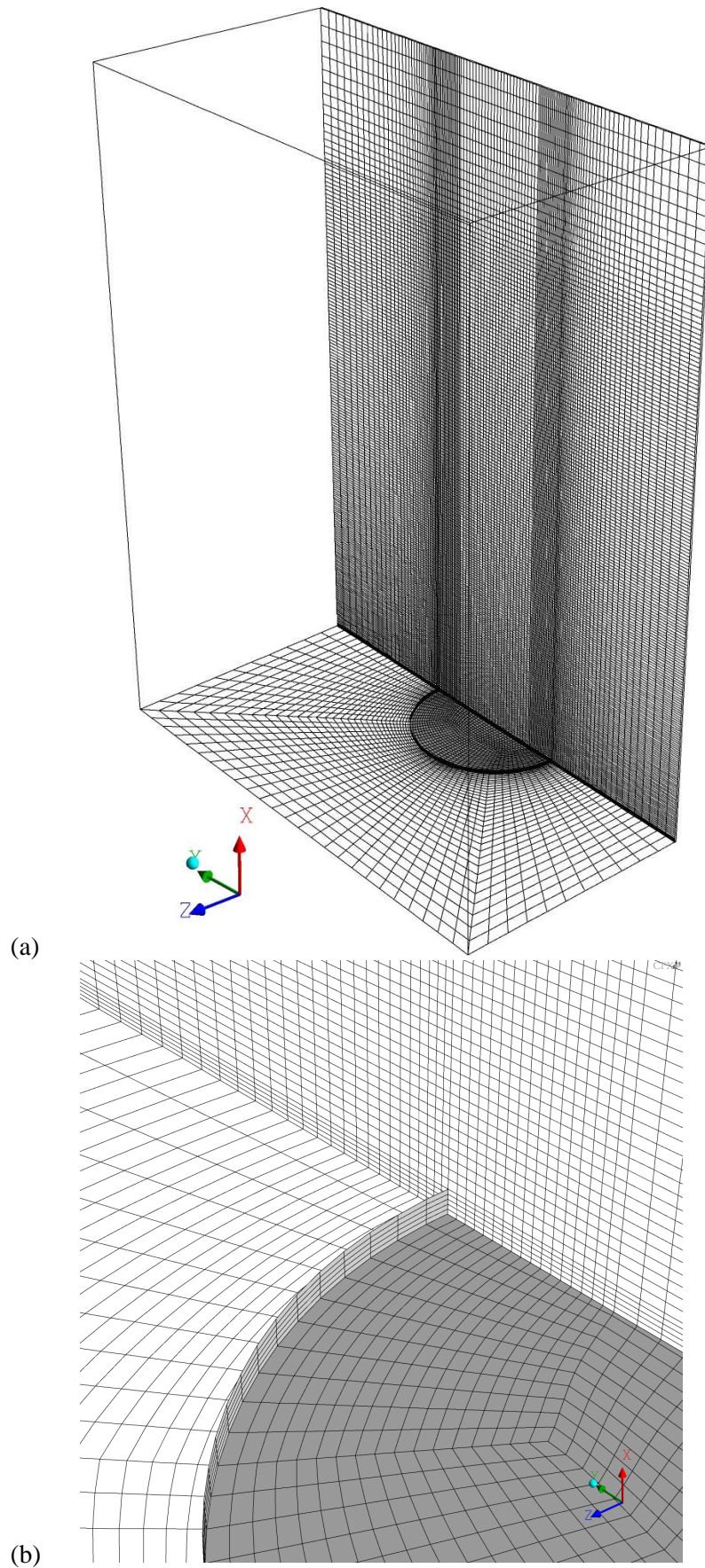
Das Verhältnis der Höhe der Geometrie zum Pooldurchmesser soll 4:1 betragen, um einen Einfluss der oberen Randbedingung ( $\rightarrow$  Kap. 5.3) auf die Flamme auszuschließen. Da die Ausdehnung der Flamme über den Pooldurchmesser hinaus eher gering ausfällt, wird das Verhältnis der horizontalen Ausdehnung zum Pooldurchmesser nur als 3:1 festgelegt. Die Höhe der Geometrie beträgt also  $x = 80$  m bei einem Pooldurchmesser von  $d = 20$  m. Der Koordinatenursprung liegt wiederum in der Poolmitte, somit beträgt die maximale  $z$ -Koordinate  $z = 30$  m und die Ausdehnung entlang der  $y$ -Achse beträgt in positiver sowie negativer Richtung jeweils 30 m. Bei einem Pooldurchmesser von  $d = 10$  m sind die Ausmaße der Geometrie dementsprechend 40 m in  $x$ -Richtung, 15 m in  $z$ -Richtung und jeweils 15 m in positiver und negativer  $y$ -Richtung. Wie in Kap. 5.2.1 besprochen, wird der Pool von einer niedrigen Wand umfasst. Die Höhe der Poolwand beträgt bei einem Pooldurchmesser von  $d = 20$  m  $H_{\text{Rim,K20}} = 0.5$  m bzw.  $H_{\text{Rim,K10}} = 0.25$  m bei  $d = 10$  m. Dieser niedrige Bereich über dem Pool wird in  $x$ -Richtung mit 5 Zellen von 0.10 m bzw. 0.05 m Höhe aufgelöst. Die beiden erzeugten Gitter sind in Abb. 5.3 exemplarisch für die Geometrie mit dem kleineren Pooldurchmesser dargestellt.

Die runde Form des Pools, in der Abbildung dunkelgrau eingefärbt, ermöglicht die Diskretisierung mit zwei ineinander verschachtelten O-Gittern [120]. Bei dieser Methode der Vernetzung wird automatisch ein zusammenhängender Block von Zellen in Form des Buchstabens O an die kreisförmigen Kurven angepasst. Dadurch wird ein zu starkes Verdrehen oder Kippen der einzelnen Zellen verhindert. Das ist wichtig, da bei ungünstigen Winkelverhältnissen die numerischen Berechnungen zunehmend ungenauer bzw. instabil werden. Die Gitter sind in der Nähe der Poolwand verfeinert, die Zellen besitzen dort eine radiale Ausdehnung von ca. 0.2 m (K20) bzw. ca. 0.1 m (K10). Innerhalb des Pools steigt diese auf maximal 0.3 m bzw. 0.2 m an. Außerhalb des Pools nimmt die Zellengröße mit zunehmendem Abstand vom Pool weiter zu. Die vertikale Ausdehnung der Zellen steigt mit zunehmendem Abstand von der Pooloberfläche von 0.2 m bei  $x = 0.5$  m auf 0.5 m bei  $x = 60$  m für die Modellierung K20. In der halb so groß dimensionierten Geometrie der Modellierung K10 steigt sie dementsprechend von 0.1 m bei  $x = 0.25$  m auf 0.25 m bei  $x = 30$  m. In größeren Höhen steigt die Zellengröße weiter an.

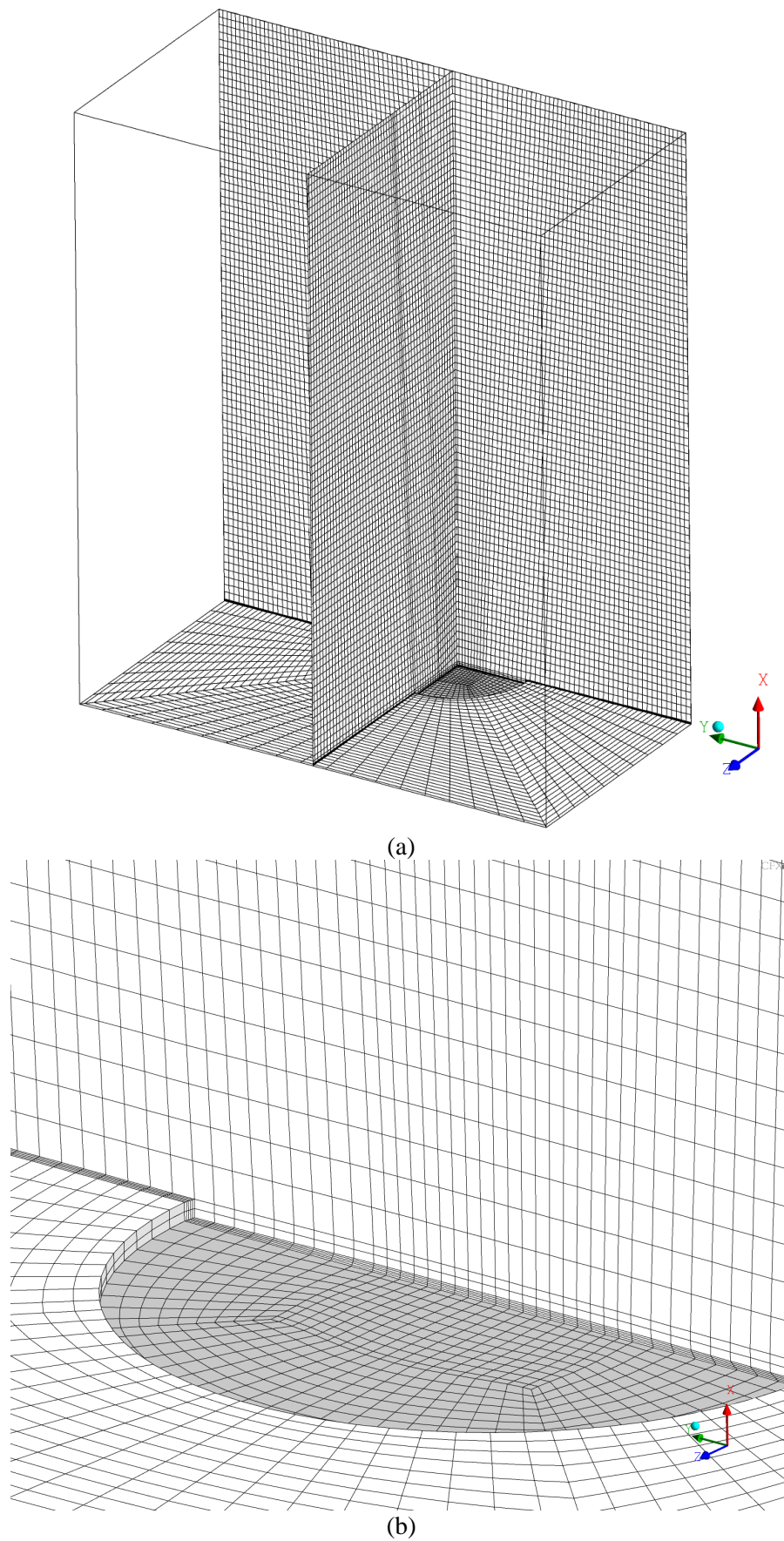
### **5.2.3 Geometrie und Gitter für die Heptan-Poolflamme bei Annahme einer Spiegelsymmetrie**

Die Modellierung der Heptan-Poolflamme erfolgt ebenso wie bei den Modellierungen K10 und K20 unter Definition einer Spiegelsymmetrie. Auch hier soll das Verhältnis von der Höhe der Geometrie zum Pooldurchmesser 4:1 betragen, die Ausdehnung in  $x$ -Richtung beträgt also





**Abb. 5.3.** Gitter zur Modellierung mit einer Spiegelebene am Beispiel der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 10$  m: (a) Zellenverteilung in der Spiegelebene und in den Bodenflächen; (b) Ausschnitt des Gitters in Poolnähe. Die Pooloberfläche ist grau eingefärbt.



**Abb. 5.4.** Gitter zur Modellierung der Heptan-Poolflamme ( $d = 6$  m) mit einer Spiegelsymmetrie: (a) Zellenverteilung in ausgewählten Ebenen; (b) Ausschnitt des Gitters in Poolnähe. Der Pool ist grau eingefärbt.

24 m. Der Koordinatenursprung liegt wiederum in der Poolmitte, die Ausmaße in y- und z-Richtung betragen ausgehend von der Poolmitte jeweils 10 m in positiver und negativer Richtung. Damit ist das Verhältnis zwischen horizontaler Ausdehnung und Pooldurchmesser mit 3.3:1 geringfügig größer als bei den beiden vorherigen Kerosin-Poolflammen

Bei Einführung einer infinit dünnen Poolwand wie bei den drei anderen Modellierungen nehmen die Zellen bei der obigen Art der Vernetzung für radiale Abstände  $(\Delta y^2 + \Delta z^2)^{1/2} \approx d/2$  unabhängig von der Höhe x sehr kleine Dimensionen in y- bzw. z-Richtung an ( $\rightarrow$  Abb. 5.1a, Abb. 5.3a). Das führt in Höhen oberhalb der Flammenlänge zu sehr gestreckten Zellen. Diese stellen für den Löser CFX kein Problem dar, führen aber in den beiden Richtungen zu wesentlich mehr Zellen als dort vor allem in größeren Höhen benötigt werden. Das führt wiederum zu einer Erhöhung der Rechenzeit. Generell sind verschiedene Ansätze möglich, um in diesem Bereich Zellen einzusparen. In der Modellierung der Heptan-Poolflamme werden die Geometrie und auch die Vernetzung leicht verändert. Anstelle der Definition einer zusätzlichen Wand um den Pool herum, wird die gesamte Pooloberfläche um eine Tiefe von 2.5 % des Pooldurchmessers, also um 0.15 m, abgesenkt. Außerdem wird eine Grenzschicht eingeführt ( $\rightarrow$  Abb. 5.4b), die entlang der definierten Grenzflächen, also dem Erdboden, der Pooloberfläche und der Poolwand zwischen den beiden Flächen, verläuft. Das führt gleichzeitig zu einer relativ gleichmäßigen Diskretisierung der darüber liegenden Geometrie.

Die Grenzschicht ist ca. 0.05 m bis 0.10 m dick und wird mit 5 Zellen normal zur Wand aufgelöst. Der Pool wird ebenfalls wie in den spiegelsymmetrischen Kerosin-Poolflammen unter Zuhilfenahme zweier O-Gitter [120] aufgelöst. Die Zellgrößen liegen in der yz-Ebene zwischen 0.2 m und 0.34 m, wobei die kleinsten Zellen jeweils am Poolrand und an den Grenzen der Geometrie liegen. Die Ausdehnung der Zellen in x-Richtung steigt von 0.1 m am Poolrand zunächst kontinuierlich auf ca. 0.31 m an und fällt dann zum Rand der Geometrie wieder leicht auf 0.2 m ab. Abb. 5.4a verdeutlicht die relativ gleichmäßige Vernetzung der gesamten Geometrie.

### 5.3 Anfangs- und Randbedingungen sowie Zeitschritte

Die Randbedingungen der vier Modellierungen stimmen teilweise überein, die Anfangsbedingungen sind identisch. Als Fluid wird Luft angenommen, bestehend aus Stickstoff, Sauerstoff und Kohlenstoffdioxid. Zusätzlich wird eine geringe Luftfeuchtigkeit angenommen. Das Vorliegen der Spezies Kohlenstoffdioxid und Wasser schon zu Beginn der Reaktion ist bei der Verwendung des Eddy-Dissipations-Modells unabdingbar. Das Modell berücksichtigt keine kinetischen Zeitskalen sondern die Konzentrationen der einzelnen Spezies und die Turbulenz in Form von  $k$  und  $\epsilon$ . Ist die Konzentration einer Spezies örtlich gleich Null, dann wird dort, auch wenn es sich um eine Produktkonzentration handelt, keine Reaktion initiiert ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.2.2).

Die Massenanteile der einzelnen Spezies im Bilanzgebiet zum Zeitpunkt  $t_0 = 0$  s sind in Tab. 5.2 aufgeführt. Die definierten Anfangsbedingungen wie z.B. Temperatur oder Druck sind in Tab. 5.4 aufgelistet. Der Druck wird relativ zum definierten Referenzdruck von  $p_{\text{ref}} = 101325$  Pa festgelegt, auf den sich alle anderen definierten und berechneten Drücke beziehen ( $\rightarrow$  Kap. 4.2.3).

**Tab. 5.2.** Zusammensetzung des Fluids zu Beginn der Berechnungen.

Spezies	Massenanteil
Stickstoff	0.760
Sauerstoff	0.232
Kohlenstoffdioxid	0.0035
H <sub>2</sub> O	0.005
Brennstoff	0.000
Ruß	0.000

Aufgrund der verschiedenen Geometrien und Brennstoffe müssen auch unterschiedliche Randbedingungen für die vier Modellierungen definiert werden. Sie sind in Tab. 5.3 aufgeführt. Die Lage der Randbedingungen kann den Abbildungen in Kap. 5.2 entnommen werden.

Als maximale Massenabbrandrate werden die experimentell ermittelten Werte für Kerosin und Heptan [30] definiert. Zum Zeitpunkt  $t = 0$  s wird die Flamme im Experiment entzündet, bzw. beginnt in der Modellierung der erste Rechenschritt. Von diesem Zeitpunkt an wächst zunächst die Größe der Flamme bis sie nach einiger Zeit ihre volle Größe ausgebildet hat. In ersten Testberechnungen hat sich gezeigt, dass die Flammen mit einem Pooldurchmesser  $d \geq 10$  m spätestens zum Zeitpunkt  $t = 20$  s ihre volle Größe erreichen, die kleinere Poolflamme mit  $d = 6$  m bereits nach etwa  $t = 15$  s.

Es zeigt sich im Experiment [36,52,121,122], dass analog zum Anwachsen der Flamme, die Massenabbrandrate von einem Minimum ausgehend auf einen annähernd konstanten Wert ansteigt. Erst wenn der Brennstoffvorrat fast aufgebraucht ist, nimmt die Massenabbrandrate wieder deutlich ab, bis sie beim Erlöschen der Flamme gleich Null ist. Die in Tab. 5.3 aufgeführten maximalen Massenabbrandraten beziehen sich auf den statistisch stationären Bereich. Es wird in den Modellierungen ein linearer Anstieg von  $\dot{m}_f'' = 0$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  s auf die

**Tab. 5.3.** Randbedingungen der vier Modellierungen.

Randbedingung	Größe	K10, K16, K20	H6
Pool	Temperatur	473 K	373 K
(Einlass)	max. Massenabbrandrate	0.039 kg/(m <sup>2</sup> s)	0.101 kg/(m <sup>2</sup> s)
Seiten und Oben	Temperatur	283 K	283 K
(Druck-Randbedingung)	rel. Druck	0 Pa	0 Pa
Boden und Poolwand	Wärmeübertragung	adiabatisch	adiabatisch
(Wand)			

tabellierten Werte vorgegeben. Der Zeitpunkt, an dem das Maximum erreicht wird, wird anhand der obigen Testberechnungen mit  $t = 20$  s bzw.  $t = 15$  s festgelegt.

Als Zeitschritte wird für die Kerosin-Poolflammen ein Zeitschritt von  $\Delta t = 0.05$  s gewählt, bei den Berechnungen mit dem aufwendigeren Heptan-Flamelet-Modell ein Zeitschritt von  $\Delta t = 0.01$  s.

## 5.4 Wahl und Konfiguration der Submodelle

### 5.4.1 Turbulenzmodell

In Kap. 4.3.1 wurden bereits die verschiedenen Turbulenzmodelle diskutiert. Die am häufigsten verwendeten Zweigleichungsmodelle wie das  $k$ - $\epsilon$  und das  $k$ - $\omega$  Modell sind ursprünglich nicht für auftriebsbestimmte, anisotrope, turbulente Naturkonvektionsströmungen entwickelt worden. Large-Eddy-Simulationen erscheinen zwar zur Beschreibung solcher Strömungen sehr geeignet, haben jedoch einen sehr hohen Rechenaufwand zur Folge. Da die Wirbel dann direkt, also ohne Modellannahmen, berechnet werden, ist eine äußerst feine Diskretisierung in Raum und Zeit erforderlich. Dies bedeutet einerseits eine feine Vernetzung der Geometrie, insbesondere aber auch eine Wahl eines sehr kleinen Zeitschrittes von  $\Delta t \approx 10^{-4}$  s. Da die Flammen im Rahmen dieser Arbeit über einen Zeitraum von etwa  $t_{\text{ges}} = 30$  s simuliert werden sollen, bedeutet dies bei der zur Verfügung stehenden Hardware bisher einen zu hohen Rechenaufwand. Dank der zu erwartenden Steigerung der Rechenleistung moderner Computer und der Möglichkeit, Parallelrechnungen auf preiswerten PC-Clustern durchzuführen, ist jedoch bereits in naher Zukunft ein standardmäßiger Einsatz von Large-Eddy-Simulationen auch für Poolflammen zu erwarten.

Das Standard- $k$ - $\epsilon$ -Modell ist wegen der im Vergleich zur LES deutlich größeren Zeitschritte von  $\Delta t = 0.01$  s bzw.  $\Delta t = 0.05$  s erheblich weniger rechenintensiv, außerdem wurden mit ihm bei Modellierungen ähnlicher Strömungen recht gute Ergebnisse erzielt [10,11]. Daher wurde im Hinblick auf die hier durchgeführten transienten Modellierungen über ein relativ langes Zeitintervall auf das  $k$ - $\epsilon$ -Modell zurückgegriffen.

**Tab. 5.4.** Anfangsbedingungen der vier Modellierungen

Größe	Wert
Temperatur	283 K
Druck	1013.25 hPa
Strömungsgeschwindigkeit	0 m/s
Dichte von Luft bei Berücksichtigung der Luftfeuchtigkeit	1.239 kg/m <sup>3</sup>
Erdbeschleunigung $\vec{g}_x$	-9.81 m/s <sup>2</sup>

### 5.4.2 Verbrennungsmodelle

Die Wahl des Verbrennungsmodells erfolgt in Abhängigkeit vom Brennstoff. Für die Modellierungen der Kerosin-Poolflammen wird das Eddy-Dissipations-Modell, bei der Heptan-Poolflamme das aufwendigere Flamelet-Modell gewählt. Die Entscheidung für diese Modelle wird im Folgenden begründet.

#### 5.4.2.1 Modellierung der Kerosin-Verbrennung mit dem Eddy-Dissipations-Modell

Ein kompletter Reaktionsmechanismus für Kerosin kann hunderte von Spezies und tausende von Elementarreaktionen umfassen. Einen kompletten Satz dieser Elementarreaktionen zu entwickeln ist äußerst aufwendig. Da Kerosin für technische Anwendungen relevant und damit auch von hohem wirtschaftlichem Interesse ist, wurden bisher keine kompletten Reaktionssätze veröffentlicht, sondern nur einzelne Auszüge (z.B. [109]). Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit die Geschwindigkeit der Verbrennungsreaktion stattdessen mit dem Eddy-Dissipations-Modell berechnet ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.2.2). Das Modell ermöglicht die Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit in Abhängigkeit von den Edukten ( $\rightarrow$  Gl. (4.45)) und den Produkten ( $\rightarrow$  Gl. (4.46)). Im Gegensatz zu den vorgemischten Flammen besitzen die Produkte in den nicht vorgemischten Poolflammen keinen nennenswerten Einfluss auf die Reaktionsgeschwindigkeit. Daher wird im Rahmen dieser Arbeit Gl. (4.46) deaktiviert.

#### 5.4.2.2 Modellierung der Heptan-Verbrennung mit dem Flamelet-Modell

Für die Berechnung der Verbrennungsreaktionen in einer Heptan-Poolflamme wird das Flamelet-Modell ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.2.3) gewählt. Das Modell stellt einen entscheidenden Fortschritt zur Modellierung mit dem Eddy-Dissipations-Modell dar. Der gewählte Reaktionsmechanismus berücksichtigt 59 Spezies und 283 Elementarreaktionen. Somit können beispielsweise Informationen über die Konzentrationen von Schadstoffen wie CO ermittelt werden. Die Berechnung der Konzentration von Zwischenprodukten wie Acetylen ermöglicht die Verwendung komplexerer Rußmodelle ( $\rightarrow$  Kap. 5.4.3). Der Zunahme an Informationen steht allerdings eine weitaus höhere Anforderung an die Rechenzeit von etwa 7:1 im Vergleich mit dem Eddy-Dissipations-Modell gegenüber.

Das Flamelet-Modell erfordert Anfangs- und Randwerte für den Mischungsbruch. Dem Mischungsbruch wird im gesamten Bilanzgebiet ein Anfangswert von  $\xi = 0$  zugewiesen. Dies ist gleichbedeutend mit der Abwesenheit des Brennstoffs. Der gleiche Wert wird dem Mischungsbruch an den Randbedingungen zugewiesen. Lediglich am Einlass wird ein Brennstoffstrom durch einen Wert von  $\xi = 1$  dargestellt.

### 5.4.3 Rußmodelle

#### 5.4.3.1 Rußmodellierung mit dem Magnussen-Modell

Das Magnussen-Modell [110] bietet sich zur Modellierung der Rußbildung bei der Kerosinverbrennung aus zwei Gründen an. Zum einen stellt es eine direkte Erweiterung des eingesetzten Eddy-Dissipations-Modelles dar und dient zur Berechnung von Verbrennungsproduk-



ten wie Ruß und  $\text{NO}_x$ . Außerdem berechnet es die Rußbildung in direkter Abhängigkeit vom Brennstoffmassenanteil. Dies ist zwingend erforderlich, da im Rahmen dieser Arbeit die Verbrennung von Kerosin zu Kohlendioxid und Wasser in einer Ein-Schritt-Reaktion ohne Entstehung jeglicher Zwischenprodukte beschrieben wird ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.2.2).

Da der Rußmassenanteil direkt vom Brennstoffmassenanteil abhängt und zu Beginn der Modellierung Letzterer nahezu gleich Null ist ( $\rightarrow$  Kap. 5.3), kann das Modell numerische Instabilitäten verursachen. Um dies zu umgehen, wird das Rußmodell erst zum Zeitpunkt  $t = 3 \text{ s}$  eingeschaltet. Als Anfangs- und Randbedingungen werden sowohl der Rußmassenanteil  $Y_S$  als auch die spezifische Konzentration der Radikale  $X_{\text{Nu}}$  im gesamten Bilanzgebiet gleich Null gesetzt

### 5.4.3.2 Rußmodellierung mit dem Lindstedt-Modell

Bei der Modellierung der Heptan-Poolflamme mit Hilfe des Flamelet-Modelles werden Massenanteile für zahlreiche Spezies wie z.B. Acetylen berechnet. Wie in Kap. 2.6 beschrieben, nimmt Acetylen eine wichtige Rolle bei der Bildung von Ruß ein. Zur Rußmodellierung in der Heptanflamme wird das Lindstedt-Modell [113,114] eingesetzt, da es die Prozesse Keimbildung und Teilchenwachstum in Abhängigkeit vom Acetylen beschreibt.

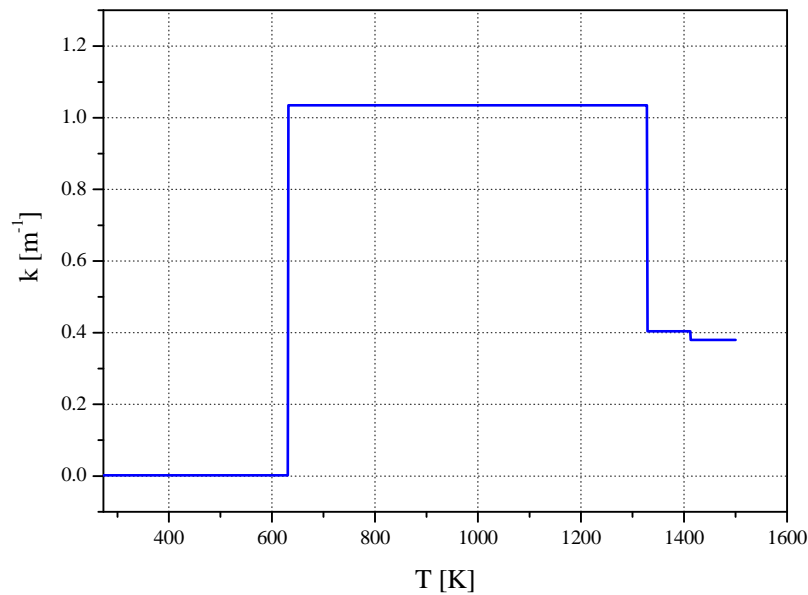
Ebenso wie bei der Modellierung der Kerosin-Poolflammen wird auch hier das Rußmodell erst ab  $t = 3 \text{ s}$  eingeschaltet, um numerische Instabilitäten vor diesem Zeitpunkt wegen zu niedriger Speziesmassenanteile zu umgehen. Als Anfangs- und Randbedingungen werden sowohl der Rußmassenanteil  $Y_S$  als auch die Partikeldichte  $N$  im gesamten Bilanzgebiet gleich Null gesetzt

## 5.4.4 Wärmestrahlungsmodell und Absorptionskoeffizient

Die großen Inhomogenitäten im Bilanzgebiet bezüglich Temperatur und Spezieskonzentrationen führen zu stark variierenden Absorptionskoeffizienten. Daher wird zur Berechnung der Wärmestrahlung die für diese Bedingungen prädestinierte Monte-Carlo Methode ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.4.2) gewählt. Es wird eine sogenannte Historie von 20000 gewählt, d.h. dass innerhalb jedes Zeitschrittes der Weg von 20000 Photonen im Bilanzgebiet verfolgt wird. Das Wärmestrahlungsmodell wird bei allen Modellierungen zum Zeitpunkt  $t = 1 \text{ s}$  eingeschaltet. Vorher können wegen der kaum ausgebildeten Flamme zu niedrige Absorptionskoeffizienten auftreten, die dann zu numerischen Instabilitäten führen. Die Berechnung des Absorptionskoeffizienten erfolgt gemäß den beiden nachfolgend beschriebenen Methoden.

### 5.4.4.1 Berechnung des Absorptionskoeffizienten bei der Modellierung der Kerosin-Poolflammen

Schönbucher et al. [7,75-77] geben im Rahmen des Wärmestrahlungsmodells OSRAMO II ( $\rightarrow$  Kap. 2.8.1.3) für die einzelnen kohärenten Strukturen einer Poolflamme wie hot spots, Rußballen und Reaktionszone sowohl ihre mittlere Temperatur als auch ihren mittleren Absorptionskoeffizienten an ( $\rightarrow$  Tab. 2.4). In Anlehnung an das Modell werden daher in den Modellierungen der Kerosin-Poolflammen die Absorptionskoeffizienten in Abhängigkeit von



**Abb. 5.5.** In den Modellierungen der Kerosin-Poolflammen eingesetzter Absorptionskoeffizient in Abhängigkeit von der Temperatur nach Schönbucher [7, 75-77].

der Temperatur festgelegt. Die entsprechenden Werte werden von OSRAMO II übernommen. Der sich daraus ergebende Zusammenhang zwischen Temperatur und Absorptionskoeffizient ist in Abb. 5.5 dargestellt. Temperaturbereiche zwischen 632 K und 1329 K werden den Rußballen zugeordnet und erhalten einen Absorptionskoeffizienten von  $k_S = 1.035 \text{ m}^{-1}$ . Zellen, in denen eine Temperatur von  $1329 \leq T \leq 1412$  vorliegt, wird ein Absorptionskoeffizient von  $k_{hs} = 0.404 \text{ m}^{-1}$  zugewiesen. In Zellen mit noch höheren Temperaturen wird ein Absorptionskoeffizient von  $k_{RE} = 0.380 \text{ m}^{-1}$  definiert. Bereiche, in denen eine Temperatur  $T < 633 \text{ K}$  vorliegt, werden als nahezu diatherm angesehen. Da die Berechnung mit einem Absorptionskoeffizienten von  $k_u = 0.000 \text{ m}^{-1}$  zu Instabilitäten führt, wird ein Wert von  $k_u = 0.002 \text{ m}^{-1}$  angenommen.

#### 5.4.4.2 Berechnung des Absorptionskoeffizienten bei der Modellierung der Heptan-Poolflamme

Bei der Modellierung der Heptan-Poolflamme wird ein anderer Ansatz zur Berechnung des Absorptionskoeffizienten gewählt als bei den Kerosin-Poolflammen. Der räumlich und zeitlich variable Absorptionskoeffizient in stark rußenden Flammen ergibt sich aus der Summe des lokalen Rußabsorptionskoeffizienten und dem Absorptionskoeffizienten des Gases:

$$k = k_S + k_{\text{Gas}}. \quad (5.1)$$

Der Absorptionskoeffizient des Gases wird in Abhängigkeit von den Stoffmengenanteilen von Kohlendioxid und Wasser berechnet [123]:

$$k_{\text{Gas}} = 0.1 \text{ m}^{-1} (x_{\text{H}_2\text{O}} + x_{\text{CO}_2}). \quad (5.2)$$



Zur Festlegung des Absorptionskoeffizienten des Rußes müssen seine optischen Eigenschaften beschrieben werden. Generell existieren verschiedene Möglichkeiten zur Modellierung der optischen Übergänge der Rußpartikel [124]. Bei Annahme eines grauen Mediums kann nach Felske und Tien [125] der Absorptionskoeffizient folgendermaßen berechnet werden:

$$k_S = 3.72 f_V T \frac{C_0}{C_2}. \quad (5.3)$$

$C_2 = 1.4388$  [cm K] ist die zweite Plancksche Konstante,  $f_V$  repräsentiert den Volumenanteil des Rußes. Unter Berücksichtigung des komplexen Brechungsindex  $m$ ,

$$m = n - ie \quad (5.4)$$

mit dem Brechungsindex  $n$  und dem Extinktionskoeffizienten  $e$ , berechnet sich  $C_0$  folgendermaßen:

$$C_0 = \frac{36\pi n e}{(n^2 - e^2 + 2)^2 + 4n^2 e^2}. \quad (5.5)$$

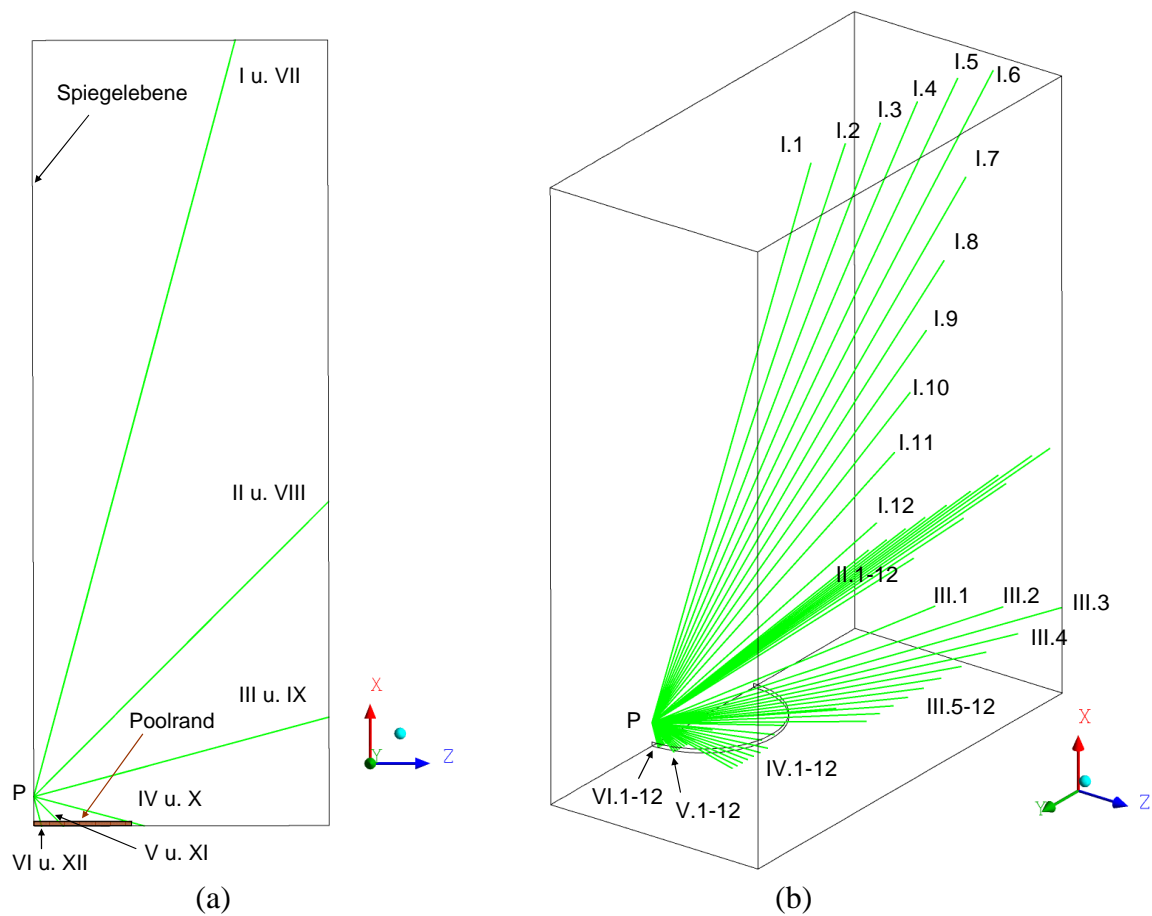
In der Literatur finden sich keine einheitlichen Angaben für die Konstanten  $m$  bzw.  $n$  und  $e$ . Eine Diskussion des häufig publizierten Wertes von  $m = 1.57 - 0.56i$  findet sich bei Smyth und Shaddix [126]. Es zeigt sich jedoch, dass auch deutlich abweichende Werte wie beispielsweise  $m = 1.90 - 0.55i$  bestimmt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wird für die Berechnung des Absorptionskoeffizienten die Beziehung [127]

$$k_S = 1862 f_V T \quad (5.6)$$

angewandt.

#### 5.4.4.3 Berechnung der Bestrahlungsstärke

Die Berechnung der Bestrahlungsstärke  $E$  erfolgt entlang festgelegter Strahlrichtungen. Dazu werden an verschiedenen Punkten in axialer und radialer Richtung virtuelle Radiometer bzw. Empfängerelemente definiert. Den Radiometern wird eine Temperatur von 0 K und eine Absorptionsempfindlichkeit von 100% zugeordnet, d.h. es werden keine Wärmeverluste an den Empfängern berücksichtigt. Der Öffnungswinkel beträgt  $180^\circ$ . In dem resultierenden Sichtfeld der Empfänger werden von den jeweiligen Radiometerkoordinaten 12·12 Strahlen zurückverfolgt, entlang denen die Strahlung integriert wird. Die für die Kerosin-Poolflamme mit  $d = 10$  m resultierenden Strahlrichtungen eines Radiometers sind in Abb. 5.6 dargestellt. In negativer y-Blickrichtung sind nur sechs in die xz-Ebene projizierten Strahlwege unterscheidbar ( $\rightarrow$ Abb. 5.6a). Da der Radiometerpunkt P direkt an der Spiegelebene liegt, sind je zwei Strahlwege deckungsgleich, z.B. die Strahlwege I und VII. Bei einem isometrischen Blickwinkel zeigt sich die Aufspaltung der Strahlen I bis VI bzw. VII bis XII in jeweils zwölf weitere Strahlwege ( $\rightarrow$ Abb. 5.6b).



**Abb. 5.6.** Strahlrichtungen zur Berechnung der Bestrahlungsstärke  $E(x,y,z,t)$  am Punkt  $P(1.5 \text{ m}, 5.0 \text{ m}, 0.0 \text{ m})$  in einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 10 \text{ m}$ . Die Strahlungsintegration erfolgt entlang der dargestellten 12·12 Strahlrichtungen: (a) Strahlen in negativer y-Richtung betrachtet – Aufgrund der Spiegelebene sind je zwei Strahlen deckungsgleich; (b) Isometrische Ansicht.

## 6 Ergebnisse und Diskussion

### 6.1 Bemerkungen zur Validierung

Die Darstellung und Diskussion der berechneten Felder und Größen wie z.B. Temperaturen, Strömungsgeschwindigkeiten und Spezieskonzentrationen in großen Heptan- und Kerosin-Poolflammen sowie deren Wärmestrahlung erfolgt in mehreren Schritten. Zunächst wird anhand der Abbildungen ihrer transienten Werte der Zusammenhang zwischen den einzelnen Feldgrößen in Kap. 6.2 verdeutlicht. Gleichzeitig erlaubt die Diskussion eine Einschätzung der Plausibilität der berechneten, momentanen Felder. Es folgt eine Betrachtung der transienten Bestrahlungsstärken (→ Kap. 6.3) sowie eine Diskussion der berechneten Dynamik der Flammen anhand ihrer Pulsationsfrequenzen und der Vergleich mit experimentellen Korrelationen (→ Kap. 6.4). Danach folgt in den Kapiteln 6.5 - 6.8 der Vergleich der berechneten zeitlichen Mittelwerte mit Messungen bzw. empirischen Korrelationen. Abschließend erfolgt in Kap. 6.5 die Diskussion der mittleren Bestrahlungsstärken der Flammen und ihre Einwirkung auf benachbarte Objekte.

Die einfache Gegenüberstellung von CFD-Simulationen und Experimenten kann streng genommen nicht als Validierung bezeichnet werden. Aus Mangel an klaren Definitionen für Validierung und Verifikation ist diese Methode jedoch lange Zeit als ausreichend betrachtet worden und ist auch heute noch sehr weit verbreitet. In jüngerer Zeit wird das Bestreben jedoch größer, genauere Abschätzungen für die experimentellen und numerischen Unsicherheiten zu ermitteln. Gemäß dem American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA) wird bei der Verifikation geprüft, ob eine Modellimplementierung das dem Modell zugrunde liegende Konzept korrekt umsetzt und seine Gleichungen korrekt löst [128]. Bei der Validierung wird hingegen geprüft, wie präzise ein Modell den Teil der "realen Welt", für den es entwickelt wurde, repräsentiert. Zur quantitativen Bewertung von Simulationen hat Oberkampf [128] daher verschiedene Kriterien definiert. Um die Fehler in Bezug auf eine Größe  $x$  anzugeben, definiert er verschiedene Kriterien. Der Fehler  $F(x)$  hängt unmittelbar vom berechneten Wert  $y_m(x)$  und dem Mittelwert  $\bar{y}_e(x)$  aus den Experimenten ab:

$$F(x) = y_m(x) - \bar{y}_e(x). \quad (6.1)$$

Der Fehler wird dabei mit einer 90%igen Wahrscheinlichkeit im Bereich

$$\left( F(x) - t_{0.05,f} \frac{s(x)}{\sqrt{n}}, F(x) + t_{0.05,f} \frac{s(x)}{\sqrt{n}} \right) \quad (6.2)$$

mit der Standardabweichung  $s(x)$  liegen. Die Verteilung  $t$  hängt von den Freiheitsgraden  $f = n - 1$  bei  $n$  Werten für  $x$  ab. Weiterhin führt er Kriterien für den durchschnittlichen und den maximalen Fehler ein:

$$\left| \frac{F}{\bar{y}_e} \right|_{\text{avg}} = \frac{1}{x_u - x_l} \int_{x_l}^{x_u} \left| \frac{y_m(x) - \bar{y}_e(x)}{\bar{y}_e(x)} \right| dx \quad (6.3)$$

$$\left| \frac{F}{\bar{y}_e} \right|_{\text{max}} = \max_{x_l \leq x \leq x_u} \left| \frac{y_m(x) - \bar{y}_e(x)}{\bar{y}_e(x)} \right| \quad (6.4)$$

Der höchste Wert der Größe  $x$  ist hier mit  $x_u$  und der niedrigste mit  $x_l$  bezeichnet. Weiterhin lassen sich für die Experimente ein durchschnittlicher relativer Konfidenz-Indikator (CI)

$$\left| \frac{CI}{\bar{y}_e} \right|_{\text{avg}} = \frac{t_{0.05v}}{(x_u - x_l)\sqrt{n}} \int_{x_l}^{x_u} \left| \frac{s(x)}{\bar{y}_e(x)} \right| dx \quad (6.5)$$

und ein dem maximalen Fehler zugeordnetes Konfidenz-Intervall definieren:

$$\left| \frac{CI}{\bar{y}_e} \right|_{\text{max}} = \frac{t_{0.05v}}{\sqrt{n}} \int_{x_l}^{x_u} \left| \frac{s(\hat{x})}{\bar{y}_e(\hat{x})} \right| dx. \quad (6.6)$$

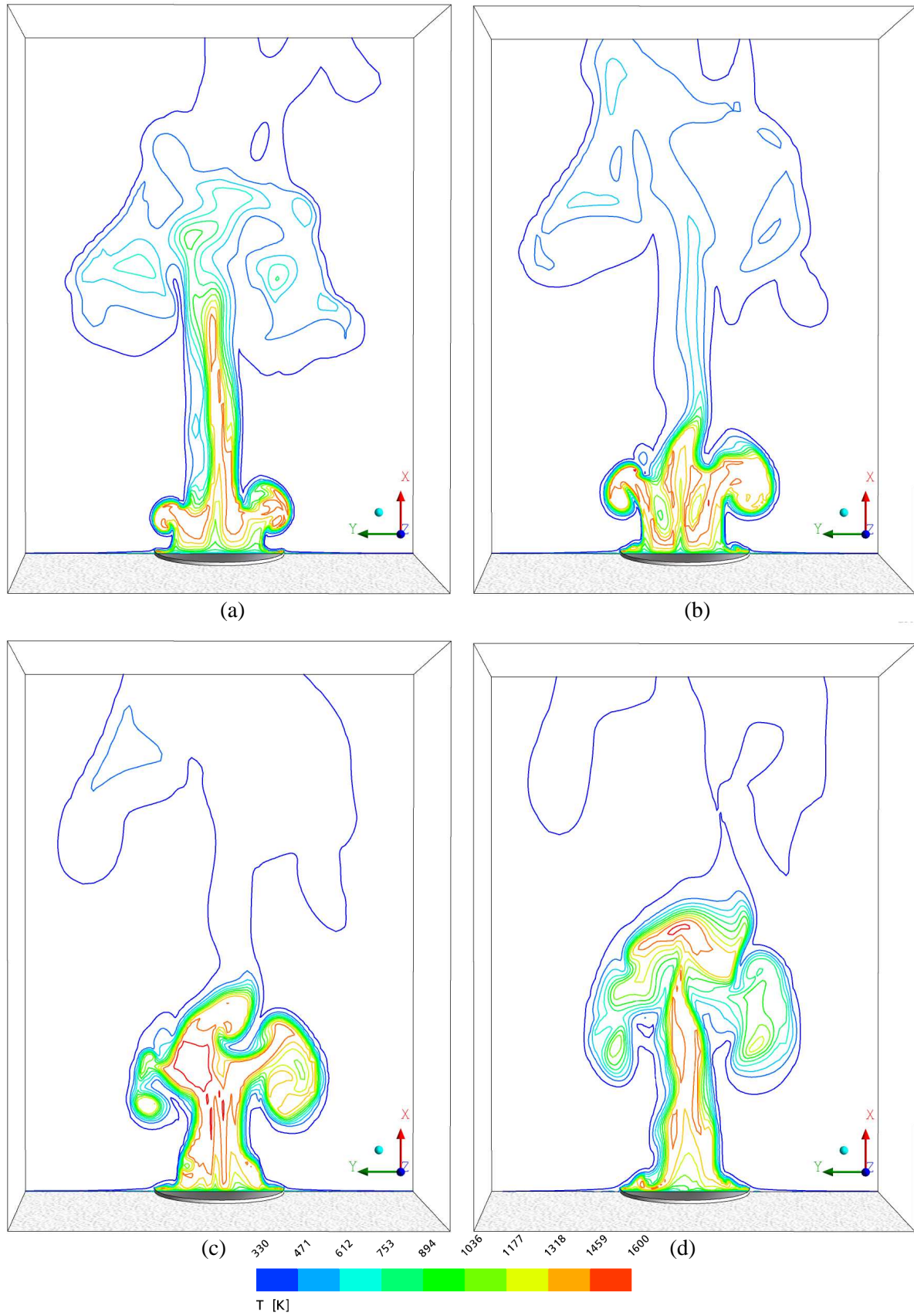
Mit Hilfe dieser Gleichungen können also die Abweichungen der Simulationsergebnisse vom Experiment quantitativ beurteilt werden. Dazu ist aber die Kenntnis der zugehörigen Messungen bzw. deren Unsicherheiten notwendig. Es sollten auch von verschiedenen Arbeitsgruppen Messungen und Korrelationen herangezogen werden, deren Unsicherheiten jedoch meist nicht bekannt sind.

In den folgenden Kapiteln werden die Simulationen direkt in Form von Feldern, Profilen und zeitlichen Mittelwerten den Experimenten gegenübergestellt, da zur Zeit noch zuwenig Messdaten vorliegen.

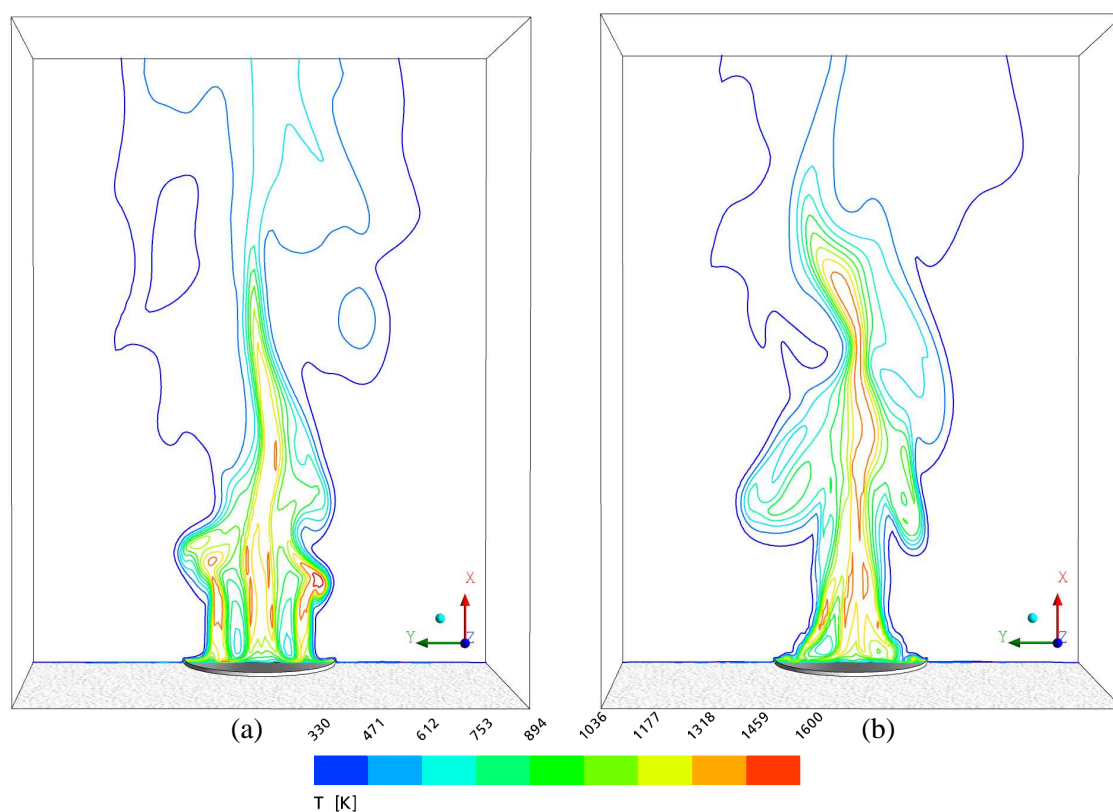
## 6.2 Transiente Felder

### 6.2.1 Temperaturfelder

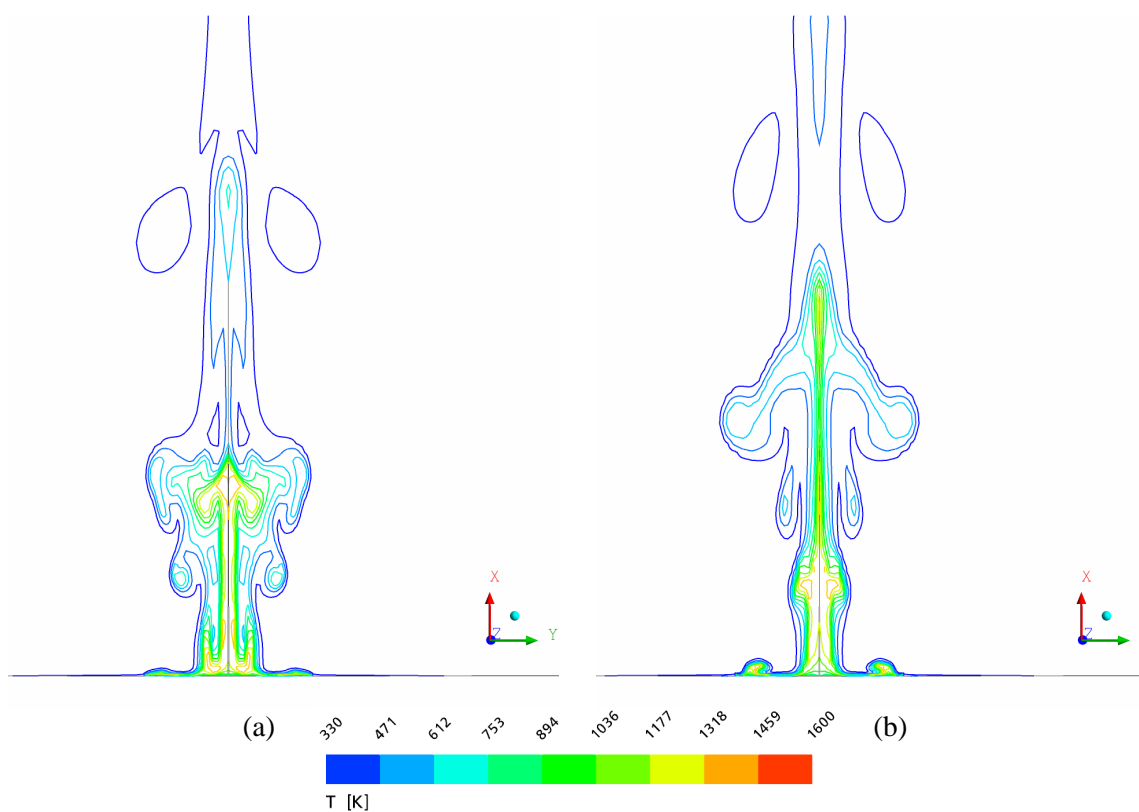
Zur qualitativen Beschreibung der Dynamik der Kerosinflamme mit dem Pooldurchmesser von  $d = 20$  mm sind in Abb. 6.1 die berechneten Isothermen zu vier verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. Das erste transiente Temperaturfeld gilt für den Zeitpunkt  $t_1 = 22$  s nach Zündung der Flamme, die darauf folgenden für  $t_2 = 23$  s,  $t_3 = 24$  s und  $t_4 = 25$  s. In den vier Feldern ist ein Pulsieren der Flamme erkennbar, das seinen Ursprung direkt am Poolrand hat. Zum Zeitpunkt  $t_1 = 22$  s ist eine deutliche Ausbauchung der Isothermen über dem Poolrand erkennbar. Die Temperaturen sind hier mit  $1400 < T < 1500$  K deutlich höher als in den angrenzenden Bereichen. Heißere Bereiche liegen nur im Flammeninneren vor. Die heißen Flammengase besitzen eine deutlich geringere Dichte ( $\rightarrow$  Kap. 6.2.5), und steigen daher mit zunehmender Zeit auf. Dabei kühlen sie sich im äußeren Bereich der Flamme zunehmend ab, so dass im oberen Bereich der Flamme nur noch im Flammeninnern Temperaturen von  $T > 1300$  K auftreten ( $\rightarrow$  Abb. 6.1d). Wie in Kap. 2.2 beschrieben, wird durch die aufsteigenden Flammen-



**Abb. 6.1.** Transiente Temperaturfelder in der xy-Ebene der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m zu vier verschiedenen Zeitpunkten: (a)  $t_1 = 22$  s; (b)  $t_2 = 23$  s; (c)  $t_3 = 24$  s; (d)  $t_4 = 25$  s.



**Abb. 6.2.** Transiente Temperaturfelder in der xy-Ebene der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 10$  m zu zwei verschiedenen Zeitpunkten: (a)  $t_1 = 24.0$  s; (b)  $t_2 = 25.0$  s.



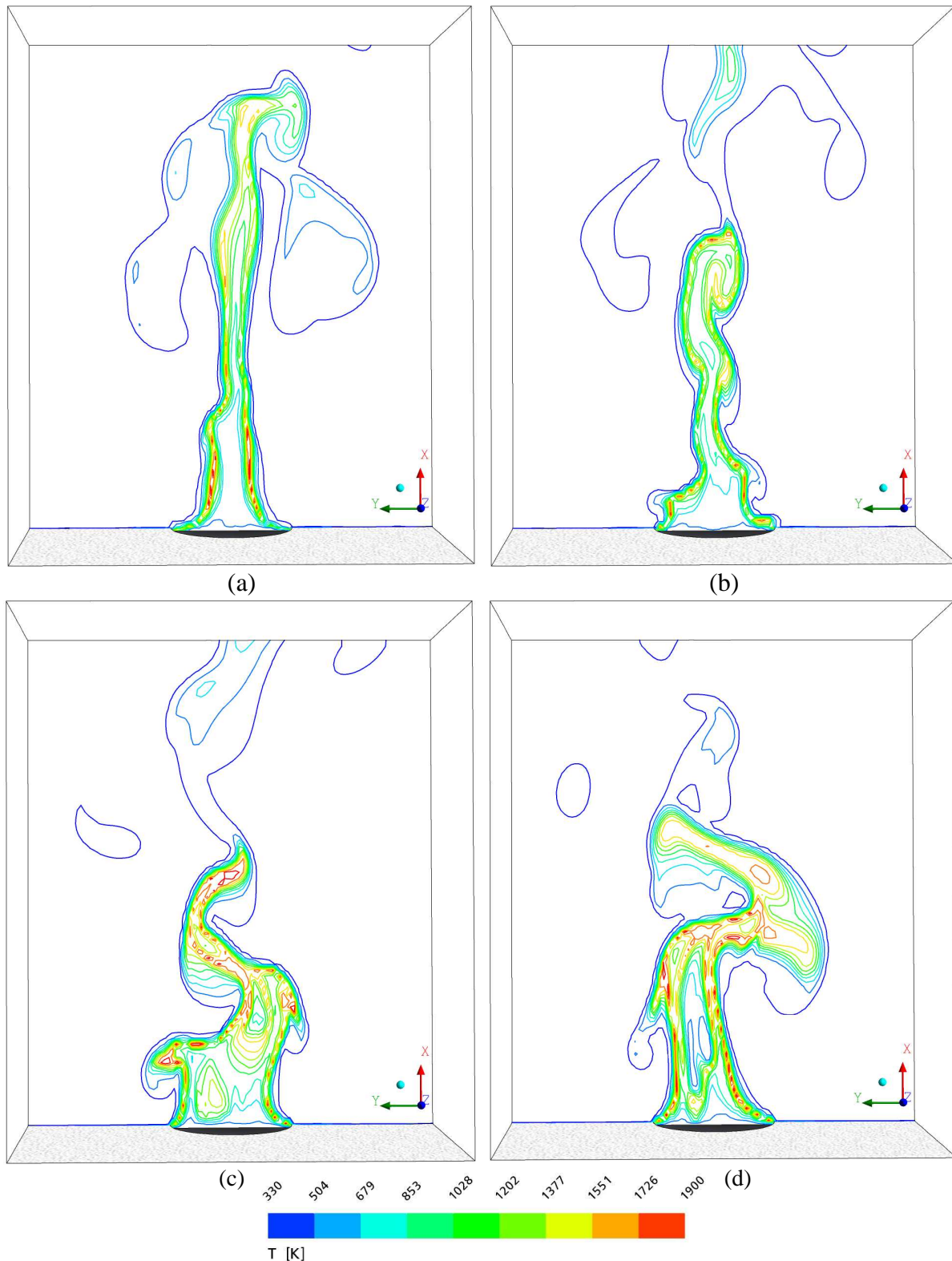
**Abb. 6.3.** Transiente Temperaturfelder in der xy-Ebene der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 16$  m zu zwei verschiedenen Zeitpunkten. Die Temperaturfelder sind an der Rotationsachse  $x$  gespiegelt: (a)  $t_1 = 27.0$  s; (b)  $t_2 = 27.8$  s.

gase unverbrauchter Luftsauerstoff angesaugt, diesen Vorgang bezeichnet man als Entrainment. Zum Zeitpunkt  $t_4 = 25$  s liegen in der Nähe des Poolrandes wieder sehr hohe Temperaturen vor und es wird ein weiterer Zyklus gestartet.

In Abb. 6.2 und Abb. 6.3 sind für die Kerosin-Poolflamme mit  $d = 10$  m und die spiegelsymmetrische Kerosinflamme mit  $d = 16$  m jeweils zwei Temperaturfelder zu zwei bestimmten Zeitpunkten dargestellt. Auch in diesen beiden Flammen sind die Pulsationen anhand der besprochenen Ausbauchungen der Isothermen zu erkennen. Das Pulsieren der Flammen tritt in allen Simulationen auf, allerdings mit unterschiedlichen Frequenzen. Diese Beobachtung stimmt mit experimentellen Ergebnissen überein ( $\rightarrow$  Kap. 2.2). Die Gegenüberstellung der in Experiment und Simulation ermittelten Pulsationsfrequenzen in Abhängigkeit vom Pooldurchmesser erfolgt in Kap. 6.4.

Der Vergleich der Abbildungen 6.1 – 6.3 zeigt, dass die Annahme symmetrischer Verhältnisse in einigen Bereichen der Flammen zu den jeweils gewählten Zeitpunkten sehr gut zutrifft, während an anderen Stellen die Verhältnisse sehr stark davon abweichen können. Dabei stellt die Annahme einer Rotationssymmetrie die deutlichste Vereinfachung dar. So ist beispielsweise in den Isothermen in der Spiegelebene der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 10$  m ( $\rightarrow$  Abb. 6.2a) nur bis zur Höhe  $x = 4$  m eine klare Symmetrie zu erkennen, in den Bereichen darüber jedoch fast ausschließlich nur in der unmittelbaren Nähe der Flammenachse. Im Gegensatz dazu wirken jedoch die Isothermen der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m in Abb. 6.1 über weite Bereiche der  $xy$ -Ebene annähernd rotationssymmetrisch. Eine Beurteilung der Symmetrieverhältnisse wird also je nach betrachtetem Ort und Zeitpunkt unterschiedlich ausfallen. Im Nahbereich des Pools scheint jedoch die Annahme der Rotationssymmetrie auch im transienten Fall durchaus zulässig. Eine nahezu vollkommen rotationssymmetrische Flamme ist nur für den Fall zu erwarten, dass keine Störungen von außen auf sie einwirken.

Der große Vorteil, der durch die Symmetrieannahmen erreicht wird, ist die deutliche Verkürzung der Rechenzeit. Durch die Einsparung der dritten Dimension kann die Simulation für  $d = 16$  m z.B. auf einem PC in ca. 24 Stunden durchgeführt werden. Dahingegen erfordert z.B. die Simulation für  $d = 20$  m, bei der drei Dimensionen mit einer Spiegelebene verwendet werden, auf dem vorhandenen Cluster bei Nutzung von 8 Prozessoren mehr als 30 Tage Rechenzeit. Für die Modellierung der ebenfalls als spiegelsymmetrisch angenommenen Heptan-Poolflamme werden auf demselben Computersystem mit dem numerisch aufwendigeren Flamelet-Modell etwas mehr als zwei Monate benötigt. Insbesondere wenn zunächst einmal zeitlich gemittelte Ergebnisse betrachtet werden sollen, bei denen nach der Mittelung über ein ausreichend langes Zeitintervall eine Rotationssymmetrie zu erwarten ist, ist die Modellierung mit Symmetrierandbedingungen also durchaus sinnvoll. Auch die dynamischen Vorgänge in niedrigen Höhen über der Pooloberfläche können in den Simulationen mit den beiden unterschiedlichen Symmetrieannahmen gut berechnet werden. Auch wenn bei der Rotationssymmetrie die Ergebnisse nicht dreidimensional aufgelöst sind, kann dennoch die oben beschriebene Pulsation der Flamme innerhalb einer Ebene gut wiedergegeben werden. Die zeitlichen Schwankungen des Temperaturfeldes haben z.B. Auswirkungen auf die spezifische Ausstrahlung der Flamme und somit auf die Bestrahlungsstärke auf benachbarte Objekte und Personen ( $\rightarrow$  Kap. 6.3 u. Kap. 6.8).



**Abb. 6.4.** Transiente Temperaturfelder in der xy-Ebene einer Heptan-Poolflamme mit  $d = 6$  m zu vier verschiedenen Zeitpunkten: (a)  $t_1 = 21.0$  s; (b)  $t_2 = 22.0$  s; (c)  $t_3 = 23.0$  s; (d)  $t_4 = 24.0$  s.

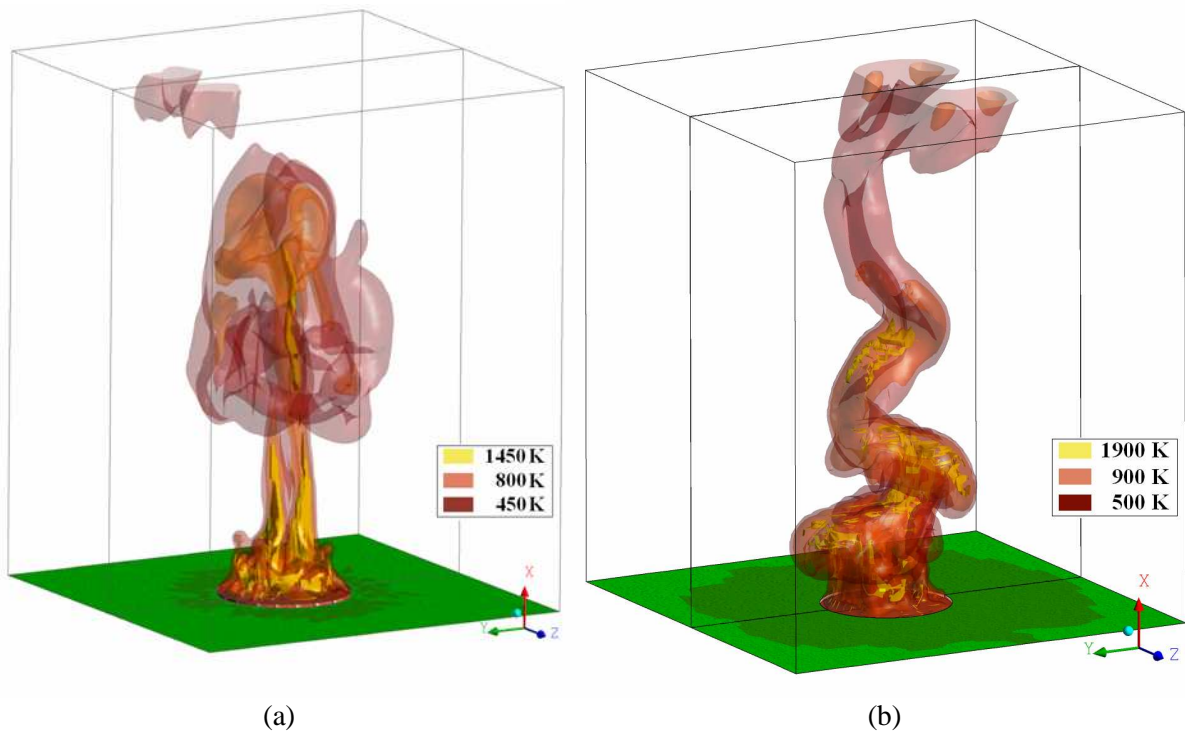
Die berechneten Isothermen der Heptan-Poolflamme zeigen gegenüber denen der Kerosin-Poolflammen einige Unterschiede ( $\rightarrow$  Abb. 6.4). In den Kerosinflammen steigen nahezu zeitgleich entlang der gesamten Poolumrandung ringähnliche Strukturen auf, was zu der gezeigten spiegelsymmetrischen, oder zumindest recht gleichmäßigen Ausbauchung der Isothermen



in der gezeigten Ebene führt. In der Heptanflamme erscheinen demgegenüber die Ausbuchtungen in der gezeigten xy-Ebene je nach beobachteter Seite zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Bei  $t_3 = 23$  s ist dies beispielsweise bei  $x_1 \approx 5$  m und  $y_1 \approx 5$  m zu erkennen und auf der gegenüberliegenden Poolseite bei etwa  $x_2 \approx 10$  m und  $y_2 \approx -5$  m ( $\rightarrow$  Abb. 6.4c). Das führt dazu, dass sich die Flamme anschließend deutlich neigt ( $\rightarrow$  Abb. 6.4d). Das abwechselnde Neigen der Flamme in verschiedene Richtungen tritt über das gesamte berechnete Zeitintervall auf.

Die Bereiche mit sehr hohen Temperaturen liegen in der Heptan-Poolflamme überwiegend an der Flammenoberfläche vor, zum Flammeninnern nehmen die Temperaturen in der Regel deutlich ab. Somit unterscheidet sich die Heptanflamme von den Kerosinflammen, in denen fast durchgängig größere Bereiche hoher Temperaturen in der Nähe der Flammenachse auftreten. Weiterhin sind auch die heißen Zonen an der Flammenoberfläche der Heptanflamme immer wieder unterbrochen, sie scheinen mehr wie eine Ansammlung vieler kleiner, heißer Bereiche. Hier macht sich offenbar der Einfluss des Verbrennungsmodells bemerkbar, dass bei einer kritischen skalaren Dissipationsrate  $\chi_{cr}$  eine lokale Flammenlöschung ermöglicht ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.2.3) und somit zur Unterbrechung der Flammenfronten führt.

Die berechneten Maximaltemperaturen fallen in den vier Flammen teilweise sehr unterschiedlich aus. Während in den beiden Kerosin-Poolflammen mit dem kleineren ( $d = 10$  m) und mittleren Pooldurchmesser ( $d = 16$  m) Maxima von  $T_{\max} \approx 1610$  K erreicht werden, treten in der größeren Kerosin-Poolflamme ( $d = 20$  m) Maxima von  $T_{\max} = 1835$  K auf. Die Erhöhung des Pooldurchmessers bewirkt bei dieser Größenordnung also eine deutliche Temperaturänderung. Der Einfluss des Brennstoffes auf die maximalen Temperaturen ist jedoch noch größer. Die Maxima in der Heptan-Poolflamme sind mit  $T_{\max} \approx 2050$  K trotz des kleineren



**Abb. 6.5.** Isoflächen gleicher Temperatur: (a) Kerosin-Poolflamme,  $d = 20$  m,  $t = 26$  s; (b) Heptan-Poolflamme,  $d = 6$  m,  $t = 23$  s. Beide Geometrien wurden an der Symmetrieebene gespiegelt.

Pooldurchmessers von  $d = 6$  m wesentlich höher als in den Kerosinflammen. Heptan hat zwar mit  $\Delta h = 4455$  kJ/kg nahezu die gleiche Verbrennungsenthalpie wie Kerosin [129], die Massenabbrandrate ist mit  $\dot{m}_f'' = 0.074$  kg/(m<sup>2</sup>s) jedoch fast exakt doppelt so groß wie die des Kerosins [30]. Dementsprechend ist die Wärmefreisetzungsrate der Heptanflamme deutlich höher und es treten höhere Temperaturen auf.

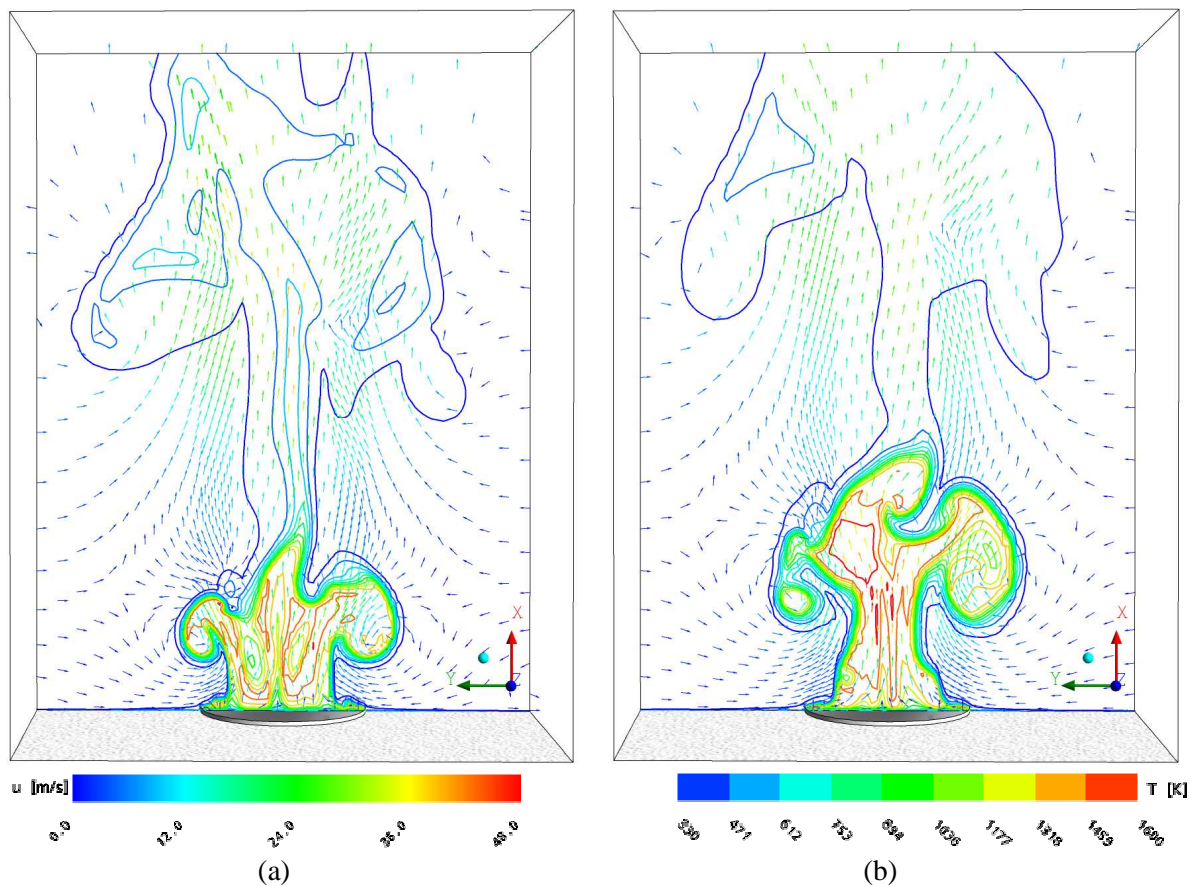
In Abb. 6.5 sind für die Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m und für die Heptan-Poolflamme jeweils drei Flächen gleicher Temperatur zu einem bestimmten Zeitpunkt dargestellt. Die Abbildung vermittelt ergänzend zu den vorherigen Abbildungen einen Eindruck über die dreidimensionalen, momentanen Flammenkonturen. Zur besseren Veranschaulichung wurden die Geometrien an der Symmetrieebene gespiegelt. Die gelben Bereiche repräsentieren die jeweils höchsten Temperaturen, die zunehmend dunkler werdenden Farben repräsentieren niedrigere Temperaturen. In der Darstellung der Kerosinflamme ist die typische Einschnürung der Flamme über der hellen Verbrennungszone ( $\rightarrow$  Kap. 2.2) zu erkennen. Bis zu dieser Höhe treten überwiegend sehr hohe Temperaturen auf. Darüber wird die Flamme zu diesem Zeitpunkt sprunghaft breiter, jedoch sind die Temperaturen in größeren radialen Abständen deutlich niedriger. Die hohen Temperaturen treten vor allem in der Nähe der Flammenachse auf. In der Heptanflamme ist zum gewählten Zeitpunkt kurz über der Pooloberfläche eine Ausbuchtung der Isoflächen zu erkennen. Die maximalen Temperaturen treten hauptsächlich in den äußeren Bereichen der Flamme auf.

Die momentanen Temperaturen in Abb. 6.5 sind, ebenso wie die zuvor dargestellten zweidimensionalen Temperaturfelder, im Einklang mit experimentellen Beobachtungen. Ein genauerer Vergleich mit Messergebnissen erfolgt anhand gemittelter Felder und Größen in Kap. 6.5.

### 6.2.2 Strömungsfelder

Zur Verdeutlichung des Zusammenhangs zwischen Strömungs- und Temperaturfeld werden die Änderungen zwischen jeweils zwei kurz aufeinander folgenden transienten Feldern besprochen. Die im Folgenden beschriebenen Strömungsvorgänge finden sowohl in den drei simulierten Kerosin-Poolflammen als auch in der simulierten Heptan-Poolflamme statt. Exemplarisch sind in Abb. 6.6 zwei transiente Strömungsfelder und die dazugehörigen Isothermen in der xy-Ebene einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m dargestellt.

Es zeigt sich, dass die relativ zur Umgebungsluft schnell aufsteigenden Flammengase durch Impulsübertragung von der Umgebungsluft abgebremst und abgelenkt werden und sich dadurch Wirbelstrukturen ausbilden. Die Wirbel entstehen unmittelbar am Poolrand und steigen mit der Zeit auf. Zum Zeitpunkt  $t_1 = 23$  s ist beispielsweise eine Wirbelstruktur zu erkennen, deren Mittelpunkt mit den Koordinaten  $x_1(t_1) \approx 8$  m und  $y_1(t_1) \approx 11$  m in Abb. 6.6 über dem linken Poolrand lokalisiert ist. Der Koordinatenursprung liegt wie bei allen Simulationen in der Poolmitte. Ein weiterer Wirbel liegt mit  $x_2(t_1) \approx 47$  m und  $y_2(t_1) \approx 24$  m deutlich höher. Zum Zeitpunkt  $t_2 = 24$  s haben beide Wirbel mit  $x_1(t_2) \approx 13$  m bzw.  $x_2(t_2) \approx 53$  m deutlich an Höhe gewonnen und sich gleichzeitig mit  $y_1(t_2) \approx 14$  m bzw.  $y_2(t_2) \approx 25$  m von der Flammenachse entfernt. Außerdem ist vor allem beim unteren Wirbel eine Zunahme des Wirbeldurchmessers erkennbar. Die Bewegung und Größenänderung der Wirbel spiegelt sich in den Isothermen der Flamme wieder. Durch die Wirbel wird vermehrt Wärmeenergie senkrecht zur



**Abb. 6.6.** Transiente Strömungs- und Temperaturfelder in der xy-Ebene einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m zu zwei verschiedenen Zeitpunkten: (a)  $t_1 = 23$  s; (b)  $t_2 = 24$  s.

Flammenachse transportiert und es treten zum Zeitpunkt  $t_2$  Bereiche höherer Temperaturen auch in größeren Abständen zur Achse auf. Außerdem wird durch die Wirbel vermehrt Luft-sauerstoff in die Flamme transportiert, so dass in den zur Flamme gerichteten Wirbelbereichen die Verbrennung begünstigt ( $\rightarrow$  Kap. 6.2.3.1 - 6.2.3.2), also mehr Wärmeenergie freigesetzt wird. Dies macht sich dort durch sehr hohe Temperaturen von  $T > 1300$  K bemerkbar. Das Aufsteigen des unteren Wirbels führt zum Zeitpunkt  $t_2 = 24$  s zur bereits besprochenen Einschnürung der Flamme oberhalb der hellen Verbrennungszone und bewirkt das Entrainment. Wenn der Einfluss des aufsteigenden Wirbels auf den poolnahen Bereich abnimmt, bildet sich dort ein neuer Wirbel aus. Das periodische Aufsteigen der Wirbel äußert sich als das Pulsieren der Flamme ( $\rightarrow$  Kap. 2.2, Kap. 6.2.1).

Die maximalen Geschwindigkeiten in axialer Richtung treten bei allen Flammen in der Nähe der Flammenachse auf. Sie nehmen mit zunehmendem Pooldurchmesser der Kerosin-flammen von  $u_{x,\max} \approx 32$  m/s bei  $d = 10$  m über  $u_{x,\max} \approx 56$  m/s bei  $d = 16$  m auf  $u_{x,\max} \approx 58$  m/s bei  $d = 20$  m zu. In ähnlichem Maße nimmt der Einfluss der Wirbel auf das Strömungsfeld zu, indem diese an ihrer den Flammen abgewandten Seite eine Strömung in negativer axialer Richtung bewirken ( $\rightarrow$  Abb. 6.6). Die minimalen Werte nehmen von  $u_{x,\min} \approx -1.8$  m/s bei  $d = 10$  m über  $u_{x,\min} \approx -6.9$  m/s bei  $d \approx 16$  m auf  $u_{x,\min} \approx -9.8$  m/s bei  $d = 20$  m ab. Dieser Trend ist in Übereinstimmung mit Ergebnissen, die im Vorfeld dieser Arbeit aus der digitalen Bildanalyse großer Poolflammen erhalten wurden [57-59]. In Kap. 6.5.3 werden die berech-

neten Profile der zeitlich gemittelten axialen Geschwindigkeiten einer empirischen Korrelation gegenübergestellt.

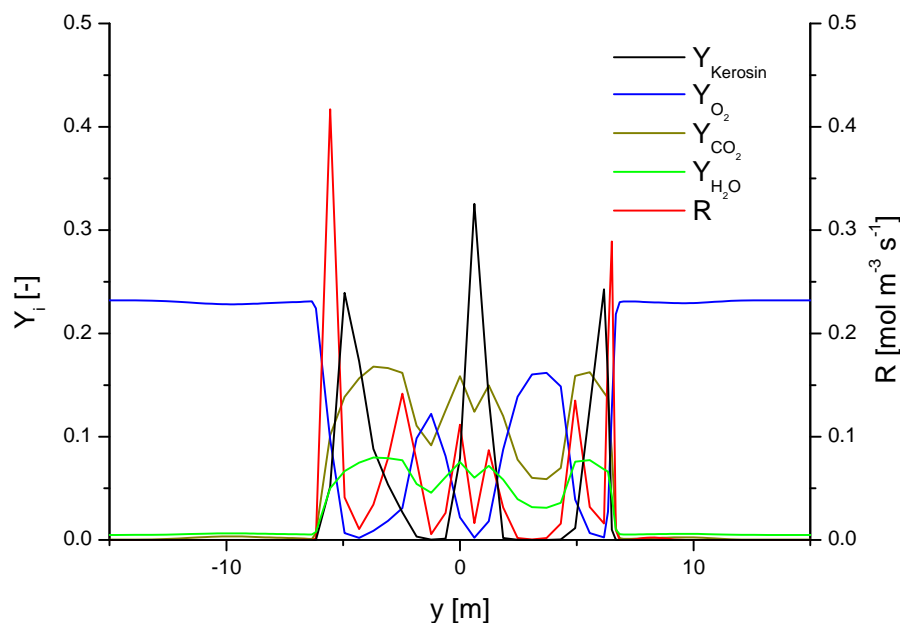
Obwohl der Durchmesser der Heptan-Poolflamme mit  $d = 6$  m deutlich kleiner als der der kleinsten simulierten Kerosin-Poolflamme mit  $d = 10$  m ist, sind dort die Geschwindigkeitsmaxima mit  $u_{x,\max} \approx 38$  m/s etwas höher als in der Kerosinflamme. Der Grund dafür liegt in den höheren Temperaturen, mit denen in dieser Flamme örtlich niedrigere Dichten einhergehen als in den Kerosinflammen. Da die Auftriebskräfte gemäß Gl. (4.8) direkt von der Dichte abhängen, werden die heißeren Flammengase stärker beschleunigt und steigen somit schneller auf. Die ausgeprägten Wirbelströmungen sorgen dafür, dass auch die abwärts gerichteten Strömungen außerhalb der Flamme mit  $u_{x,\min} = -4$  m/s deutlich stärker ausfallen als bei der kleinsten simulierten Kerosinflamme.

## 6.2.3 Massenanteile und Reaktionsraten bzw. Mischungsbruch

### 6.2.3.1 Massenanteile der Spezies und Reaktionsraten in den Kerosin-Poolflammen

Der Zusammenhang zwischen den Speziesmassenanteilen, den Reaktionsraten und dem Strömungsfeld wird in den Abbildungen Abb. 6.7 - Abb. 6.9 verdeutlicht. In allen drei Kerosinflammen können die gleichen Vorgänge beobachtet werden, die Diskussion erfolgt wie in den vorherigen Kapiteln am Beispiel der Kerosin-Poolflamme mit einem Pooldurchmesser von  $d = 20$  m.

Die aufsteigenden Brennstoffgase führen örtlich zu teilweise sehr hohen Kerosinmassenanteilen von bis zu  $Y_{\text{Kerosin}} = 0.5$ . Die Maxima liegen direkt über der Pooloberfläche. Abb. 6.8 verdeutlicht zusätzlich, dass zum Zeitpunkt  $t_1 = 23$  s durch die Wirbelströmungen oberhalb des linken und rechten Randes des Pools in der hier gezeigten xy-Ebene die Kerosingase besonders in diesen Bereichen aufwärts transportiert werden. Außerdem bewirken die Wirbel



**Abb. 6.7.** Profile der Speziesmassenanteile und der Reaktionsgeschwindigkeit  $R$  in der  $xy$ -Ebene einer Kerosin-Poolflamme ( $d = 20$  m) für  $x/d = 0.25$  zum Zeitpunkt  $t_1 = 23$  s.

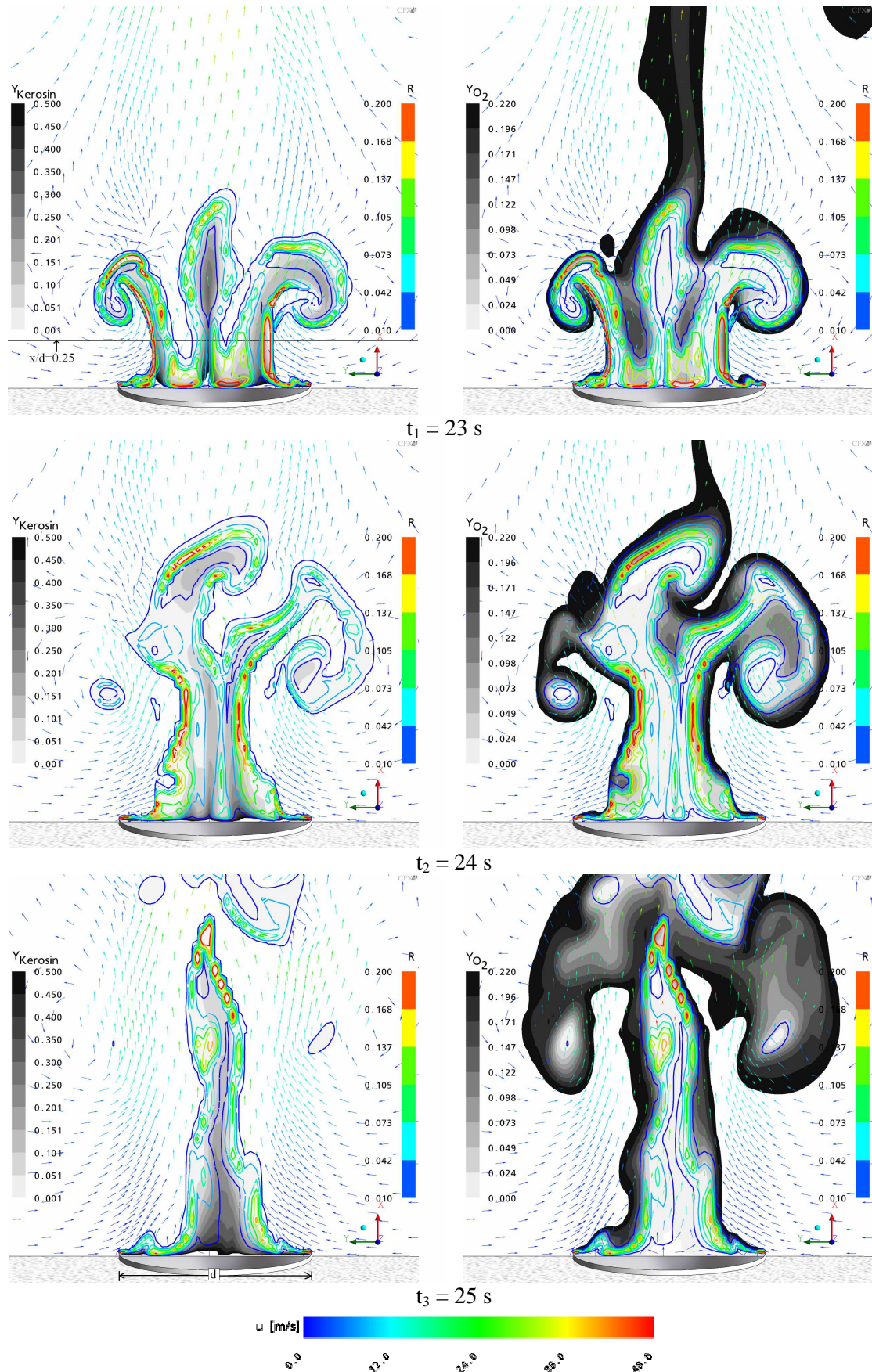
einen Luftstrom in Richtung der Flamme. Somit existieren zu diesem Zeitpunkt an der Berührungsfläche zwischen Flamme und Luft neben ausreichend hohen Temperaturen ( $\rightarrow$  Abb. 6.6) ein günstiges Mischungsverhältnis von Brennstoff zu Luft. Die Profile in der dimensionslosen Höhe  $x/d = 0.25$  verdeutlichen den Zusammenhang zwischen den Speziesmassenanteilen und den Reaktionsgeschwindigkeiten ( $\rightarrow$  Abb. 6.7). Eine Reaktionszone liegt zwischen  $-6 \text{ m} \leq y \leq -5 \text{ m}$ , hier steigt die Reaktionsgeschwindigkeit sprunghaft auf ein Maximum von  $R = 0.42 \text{ mol m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ . Innerhalb der Reaktionszone werden die Brennstoffgase ausgehend vom Flammeninnern zur Luftseite hin nahezu vollständig verbraucht. Umgekehrt nimmt der Sauerstoffmassenanteil ausgehend von der Luftseite nach innen hin auf ein Minimum nahe Null ab. Das führt dazu, dass im Flammeninnern ab  $y \approx -5 \text{ m}$  trotz eines hohen Kerosinmassenanteils von  $Y_{\text{Kerosin}} \approx 0.24$  die Reaktionsgeschwindigkeit fast auf Null absinkt. Außerhalb der Reaktionszone steigt jedoch der Massenanteil des Sauerstoffs entlang des Profils in Richtung der Flammenachse zunächst langsam und dann zwischen  $-2.5 \text{ m} \leq y \leq -1 \text{ m}$  auf maximal  $Y_{\text{O}_2} = 0.12$  wieder sprunghaft an. Dieser Anstieg ist nicht auf eine Luftzufuhr von außen zurückzuführen. Die Speziesverteilung zum Zeitpunkt  $t_3 = 25 \text{ s}$  zeigt ( $\rightarrow$  Abb. 6.8), dass sich nach dem Aufsteigen eines Wirbels die Flamme einschnürt und dadurch die Luft etwas näher zur Flammenachse vordringen kann. Erst mit dem Aufsteigen eines neuen Wirbels wird die Luft wieder von den Flammengasen verdrängt. Zum Zeitpunkt  $t_1 = 23 \text{ s}$  liegt also zwischen der äußersten Reaktionszone und der Flammenachse teilweise noch nicht verdrängter bzw. verbrauchter Sauerstoff vor. An den beiden Rändern dieser inneren sauerstoffhaltigen Zone kann sich nun jeweils eine weitere Reaktionszone ausbilden. Der Vergleich der in dem Profil erkennbaren Reaktionszonen zeigt, dass die Reaktionsgeschwindigkeiten von außen zum Flammeninnern aufgrund des abnehmenden Sauerstoffmassenanteils abnehmen.

Die Massenanteile der Reaktionsprodukte Kohlendioxid und Wasser nehmen durch die Reaktion vor allem in der äußeren Reaktionszone stark zu. Durch die zweite Reaktionszone wird ihr Anteil jedoch nicht erhöht. Dies zeigt, dass hier Mischungseffekte mit der inneren Sauerstoffzone, in der noch nahezu keine Reaktionsprodukte vorlagen, einen ebenso wichtigen Einfluss auf deren Verteilung wie die Reaktion selbst ausüben.

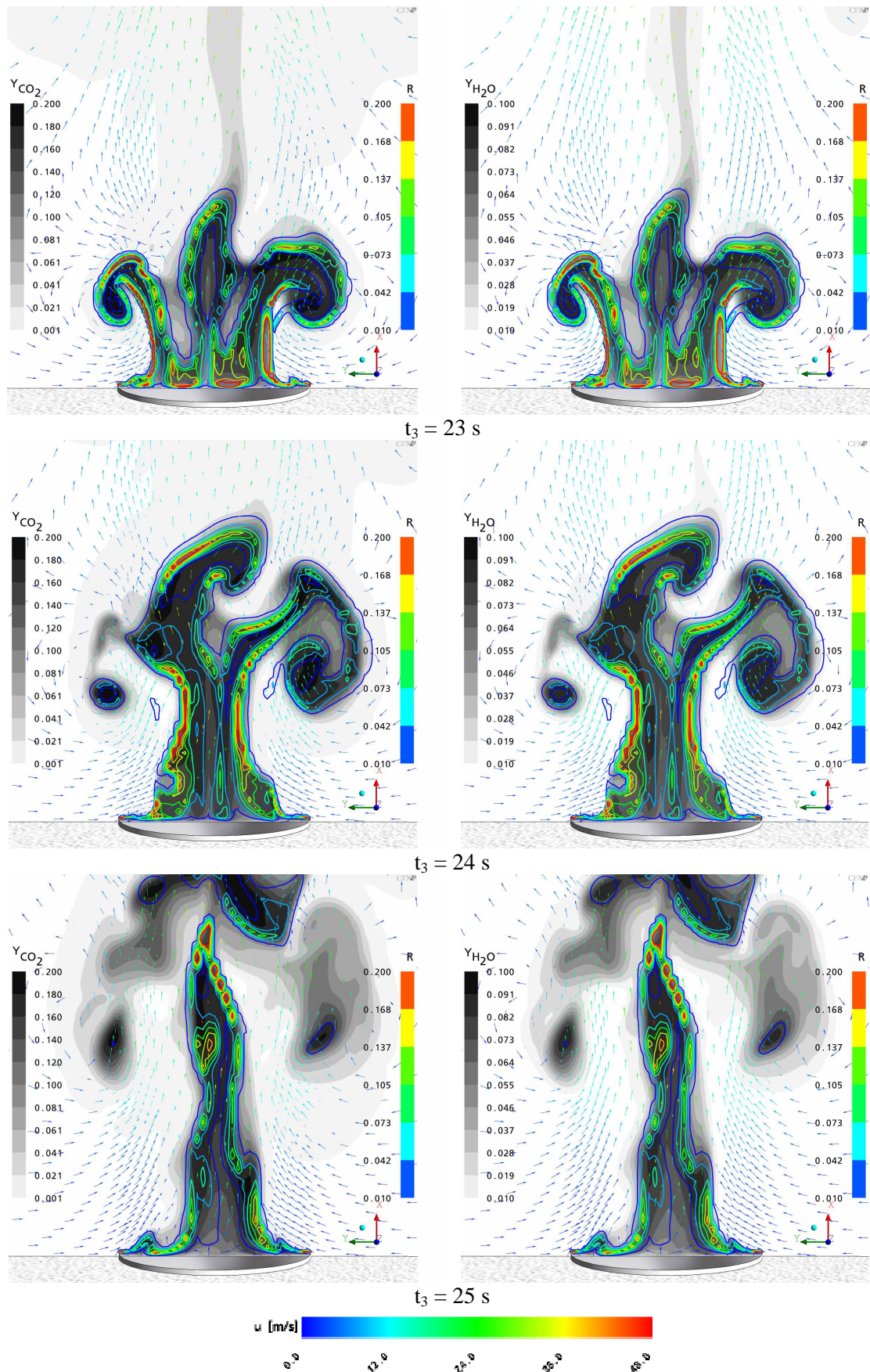
Die Profile in Abb. 6.7 zeigen sowohl für negative als auch für positive  $y$ -Koordinaten einen qualitativ identischen Verlauf. Die Absolutwerte weichen teilweise nur geringfügig, teilweise etwas stärker voneinander ab. Auch in anderen Schnittebenen stellen sich ähnliche Profile ein. Es handelt sich bei den besprochenen Vorgängen also um prinzipiell ablaufende Prozesse die durch das Wechselwirken von turbulenten Strömungen und chemischen Reaktionen über die gesamte Flamme verteilt auftreten. Gleichzeitig stellen die Profile nur eine Momentaufnahme dar, da sich die Speziesverteilungen an einem festen Ort durch die periodisch vorbeiziehenden Wirbel stets neu einstellen.

Die Gegenüberstellungen der Speziesfelder zu den drei verschiedenen Zeitpunkten in Abb. 6.8 verdeutlicht, dass mit dem Aufsteigen der Wirbel eine Abnahme des Kerosinmassenanteils in ihrem Innern einhergeht. Zum Zeitpunkt  $t_2 = 24 \text{ s}$  beispielsweise ist der Massenanteil im Zentrum des Wirbels bei  $x(t_2) \approx 13.3 \text{ m}$  und  $y(t_2) \approx 11.2 \text{ m}$  bereits auf  $Y_{\text{Kerosin}} \approx 0.02$  abgesunken, während er eine Sekunde zuvor bei  $x(t_1) \approx 9.2 \text{ m}$  und  $y(t_1) \approx 11.2 \text{ m}$  noch  $Y_{\text{Kerosin}} \approx 0.05$  betrug. Die starke Luftansaugung unterbindet den Transport von Kerosin zum Wirbel. Die chemische Reaktion führt daher zunächst zur Reduzierung des Kerosinmassenan-





**Abb. 6.8.** Transiente Strömungsfelder und Reaktionsgeschwindigkeiten  $R$  in  $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$  sowie die Massenanteile der Edukte Kerosin und Sauerstoff in der  $xy$ -Ebene einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m (Werte oberhalb 0.5 bzw. 0.22 nicht dargestellt).



**Abb. 6.9.** Transiente Strömungsfelder und Reaktionsgeschwindigkeiten  $R$  sowie die Massenanteile der Produkte Kohlenstoffdioxid und  $H_2O$  in der  $xy$ -Ebene einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m.



teils, bis dann zum Zeitpunkt  $t_3 = 25$  s der Brennstoff im Wirbel vollständig verbrannt ist. Da keine Reaktionswärme mehr freigesetzt wird, nimmt die Temperatur durch die Vermischung mit der kälteren Umgebungsluft schnell ab und folglich die Dichte der Gase entsprechend zu. Somit entfällt die Auftriebskraft gemäß Gl. (4.8) innerhalb des Wirbels, er dissipiert zunehmend. Bereits zum Zeitpunkt  $t_4 = 26$  s, in der Abbildung nicht mehr dargestellt, ist er vollständig aufgelöst bzw. hat sein Durchmesser die Dimensionen der Zellen des Rechengitters unterschritten.

Im Gegensatz zu den Eduktmassenanteilen nehmen die Produktmassenanteile im Wirbel zunächst zu. Der Anteil des Kohlendioxids steigt beispielsweise im Zeitraum zwischen  $t_1 = 23$  s bis  $t_2 = 24$  s von  $Y_{\text{CO}_2}(t_1) \approx 0.184$  auf  $Y_{\text{CO}_2}(t_2) \approx 0.191$ , der des Wassers von  $Y_{\text{H}_2\text{O}}(t_1) \approx 0.087$  auf  $Y_{\text{H}_2\text{O}}(t_2) \approx 0.090$ . Zu diesen Zeitpunkten sind die Maxima noch im Wirbelzentrum zu finden. Danach machen sich der Einfluss der Wirbelströmung und die fehlende Neubildung durch die chemische Reaktion deutlich bemerkbar. Die Maxima sind nun nicht mehr im Wirbelzentrum zu finden, sondern auf der zur Flamme gewandten Seite des Wirbels. Im oberen Teil des Wirbels überwiegen die nach außen gerichteten Geschwindigkeitskomponenten. Das führt dazu, dass die Reaktionsprodukte vom Wirbel und der Flamme wegtransportiert werden. Im unteren Teil werden die Flammengase durch die zur Flamme gerichteten Geschwindigkeitskomponenten in Richtung der Flammenachse transportiert und gleichzeitig mit Luft vermischt. Zum Zeitpunkt  $t_3 = 25$  s haben sich die Massenanteile im Wirbelzentrum bereits auf  $Y_{\text{CO}_2}(t_3) \approx 0.023$  bzw.  $Y_{\text{H}_2\text{O}}(t_3) \approx 0.015$  reduziert, während etwas weiter zur Flamme hin immer noch relativ hohe Werte von  $Y_{\text{CO}_2}(t_3) \approx 0.187$  bzw.  $Y_{\text{H}_2\text{O}}(t_3) \approx 0.088$  im Wirbel vorliegen. Je weiter die Wirbel aufsteigen, je mehr gleichen sich in ihnen die Speziesmassenanteile und die Temperaturen durch Vermischung an das Niveau der Umgebungsluft an.

Da mit dem Aufsteigen der Wirbel die Flammengase von der angesaugten Luft verdrängt und in Richtung der Flammenachse transportiert werden, verlagern sich die Zonen mit den höchsten Reaktionsgeschwindigkeiten. Wie bereits besprochen, liegen zum Zeitpunkt  $t_1 = 23$  s ihre Maxima in einem radialen Abstand zur Flammenachse von  $5 \text{ m} \leq \Delta y(t_1) \leq 6 \text{ m}$  in Höhen zwischen  $0 \text{ m} \leq x(t_1) \leq 10 \text{ m}$  vor. Eine Sekunde später haben diese Reaktionszonen mit  $6.5 \text{ m} \leq x(t_2) \leq 16.5 \text{ m}$  an Höhe gewonnen und sich gleichzeitig der Flammenachse auf den Abstand  $2.3 \text{ m} \leq \Delta y(t_2) \leq 4.3 \text{ m}$  angenähert. Die maximalen Reaktionsraten haben sich in dieser Zeit von  $R_{\text{max}}(t_1) = 0.42 \text{ mol m}^{-3} \text{ s}^{-1}$  auf  $R_{\text{max}}(t_2) = 0.21 \text{ mol m}^{-3} \text{ s}^{-1}$  reduziert. Eine weitere Sekunde später sind diese Reaktionszonen weiter auf  $25 \text{ m} \leq x(t_3) \leq 34.5 \text{ m}$  aufgestiegen und befinden sich nun in der Nähe der Flammenachse mit radialen Abständen von  $\Delta y(t_3) \leq 2 \text{ m}$ . Die Reaktionsgeschwindigkeiten haben sich mit  $R_{\text{max}}(t_3) = 0.30 \text{ mol m}^{-3} \text{ s}^{-1}$  im Vergleich zum Zeitpunkt  $t_2 = 24$  s wieder erhöht. Die Erhöhung wird nicht durch die Eduktmassenanteile verursacht, da zu beiden Zeitpunkten in diesen Bereichen vergleichbare Werte vorliegen. Es ist dort jedoch eine deutliche Erhöhung der turbulenten kinetischen Energie von  $\bar{k}(t_2) \approx 0.5 \text{ J kg}^{-1}$  auf  $\bar{k}(t_3) \approx 1 \text{ J kg}^{-1}$  und vor allem ihrer Dissipation von  $\bar{\varepsilon}(t_2) \approx 6 \text{ m}^2 \text{ s}^{-3}$  auf  $\bar{\varepsilon}(t_3) \approx 20 \text{ m}^2 \text{ s}^{-3}$  zu verzeichnen. Das bedeutet, dass sich der Quotient  $\varepsilon/k$ , der in die Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit gemäß Gl. (4.45) eingeht, in den betrachteten Zonen erhöht und somit die Reaktion beschleunigt.



### 6.2.3.2 Mischungsbruch und Massenanteile ausgewählter Spezies in der Heptan-Poolflamme

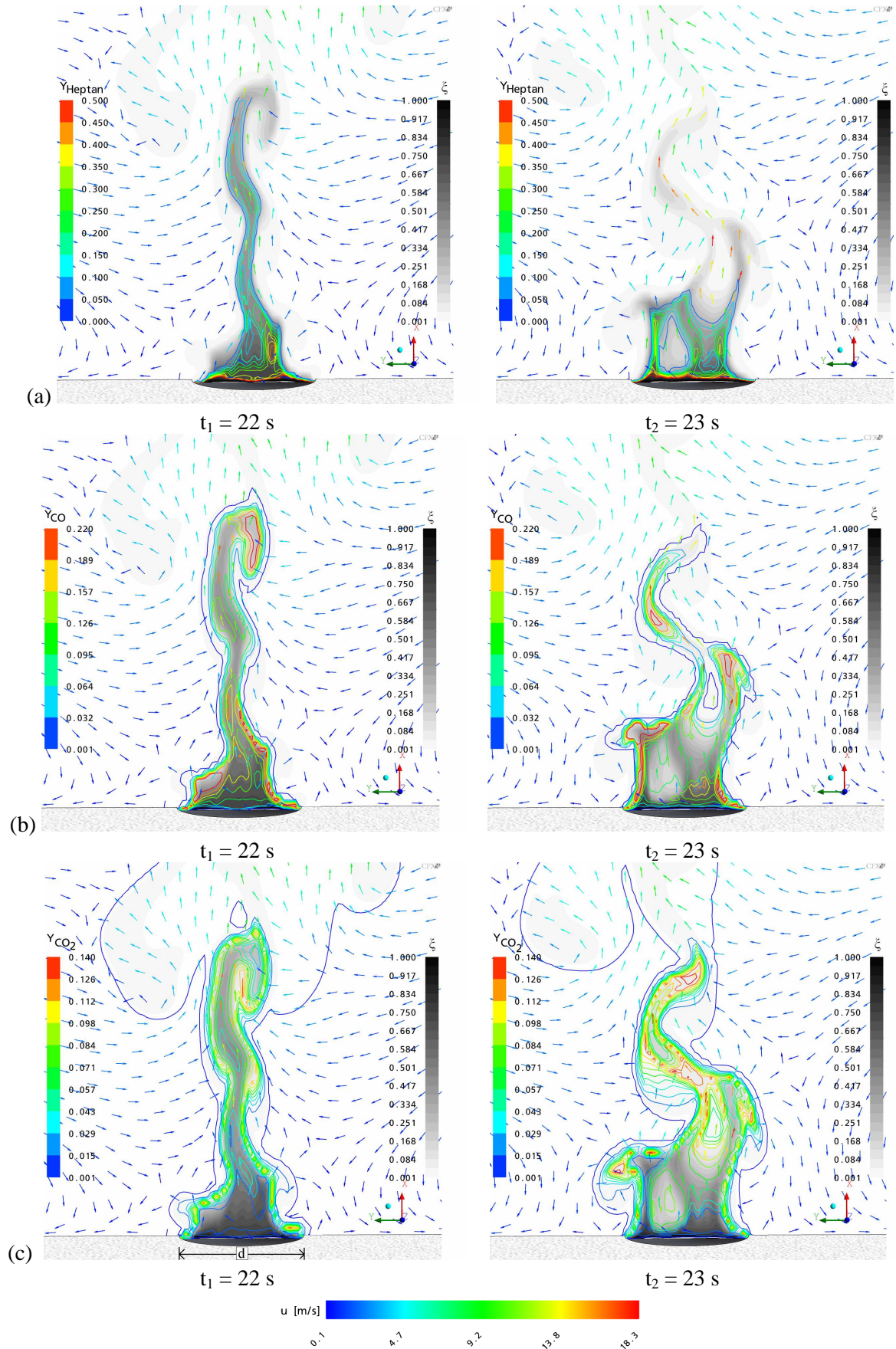
In der Heptan-Poolflamme wird je eine Transportgleichung für den Mischungsbruch und seine Varianz gelöst und die Speziesmassenanteile werden in Abhängigkeit von ihnen auf der Basis empirischer Daten berechnet ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.2.3). Da das Modell als Ergebnis keine Reaktionsgeschwindigkeiten ausgibt, werden, im Gegensatz zu den oben diskutierten Kerosin-Poolflammen, stattdessen der Mischungsbruch und außerdem einige Ausgewählte Speziesmassenanteile dargestellt.

Die Ergebnisse verdeutlichen, dass der Mischungsbruch entsprechend der Definition dort hohe Werte annimmt, wo hohe Massenanteile des Heptans vorliegen ( $\rightarrow$  Abb. 6.10a). In den Bereichen, in denen er niedrigere Werte annimmt liegen dagegen hauptsächlich Verbrennungsprodukte wie z.B. Kohlenmonoxid und Kohlendioxid vor ( $\rightarrow$  Abb. 6.10b-c). Je niedriger jedoch der Mischungsbruch ist, je niedriger sind durch Vermischung mit der Umgebungsluft auch deren Massenanteile, bis schließlich in der reinen Umgebungsluft der Mischungsbruch den Wert Null erreicht.

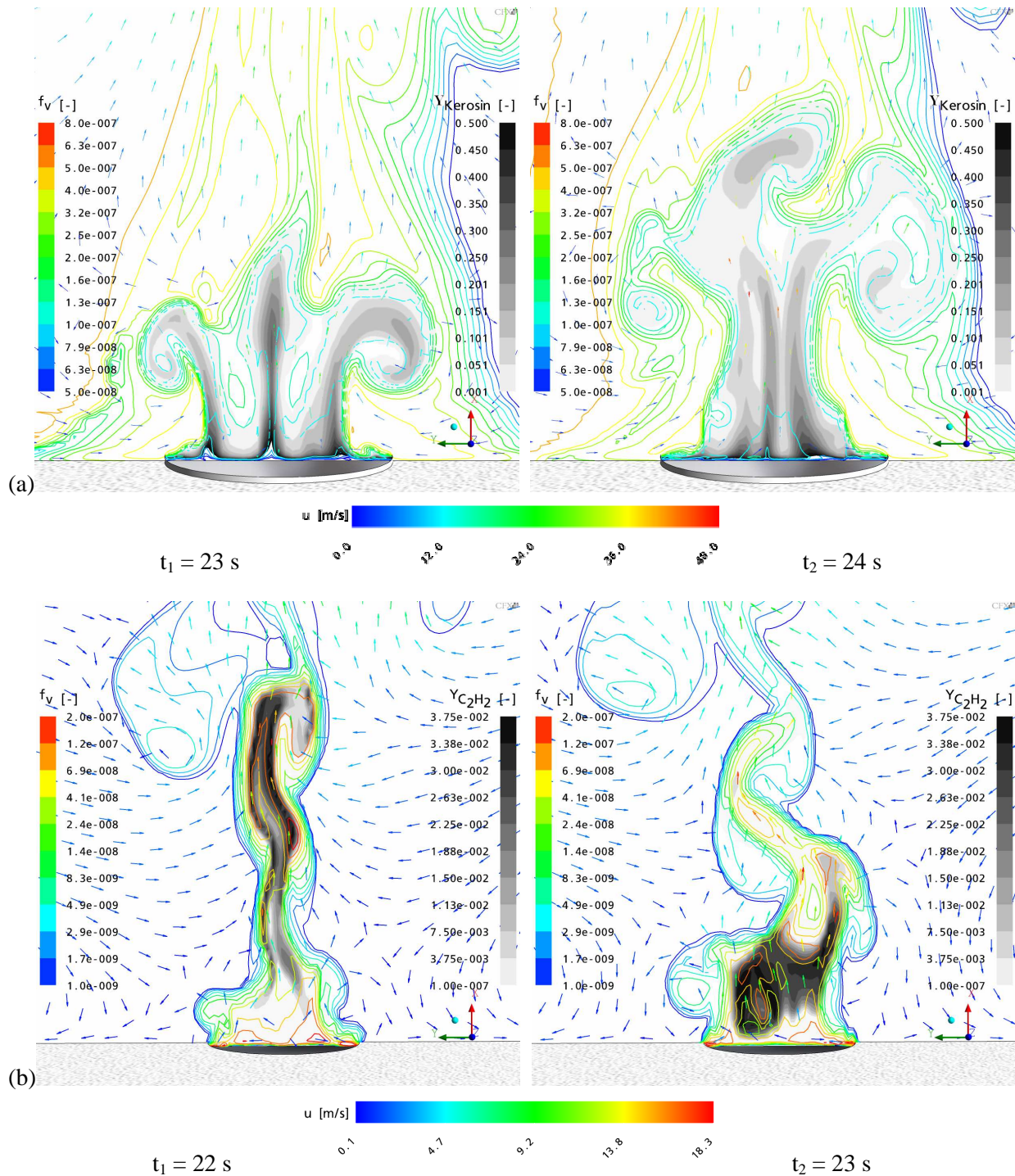
Die Speziesmassenanteile zu den beiden abgebildeten Zeitpunkten lassen, ebenso wie in den bereits besprochenen Kerosinflammen ( $\rightarrow$  Kap. 6.2.3.1), einen deutlichen Zusammenhang zwischen dem turbulenten Strömungsfeld und den chemischen Reaktionen erkennen. So ist beispielsweise in Abb. 6.10 das Aufsteigen eines Wirbels über dem Poolrand mit der y-Koordinate  $y = 3$  m zu erkennen. Zum Zeitpunkt  $t_1 = 22$  s ist er noch unmittelbar über dem Poolrand lokalisiert, eine Sekunde später ist sein Mittelpunkt auf eine Höhe von  $x(t_2) \approx 1.6$  m angestiegen. Durch den Wirbel wird nun verstärkt Heptan vom Pool in die entsprechende Höhe transportiert, zum Zeitpunkt  $t_2 = 23$  s erreicht der Massenanteil in der Höhe  $x(t_2) \approx 3$  m Maxima von  $Y_{\text{Heptan,max}}(t_2) = 0.3$ . Da der Wirbel gleichzeitig frische Umgebungsluft heranzuführt, kann sich nun auch in dieser Höhe die Reaktionsfront ausbilden. Dies lässt sich an der Verteilung der Massenanteile der Verbrennungsprodukte nachvollziehen, die sich ebenfalls mit dem Wirbel verlagern. Die Maxima des Kohlenstoffmonoxidmassenanteils liegen beispielsweise über dem Poolrand mit  $y = 3$  m zu beiden Zeitpunkten zwischen  $0.22 \leq Y_{\text{CO}}(t) \leq 0.29$ . Während sie jedoch bei  $t_1 = 22$  s auf eine maximale Höhe von  $x(t_1) \approx 1.6$  m beschränkt sind, liegen sie bei  $t_2 = 23$  s in einem zusammenhängenden Bereich ausgehend vom Poolrand bis zu  $x(t_2) \approx 4.2$  m vor. Beim Kohlenstoffdioxid als Endprodukt der Reaktionskette stellt sich neben der Verlagerung auch eine Erhöhung des Massenanteils ein. Während er zum Zeitpunkt  $t_1 = 22$  s im Höhenbereich bis etwa  $x(t_1) \approx 1.6$  m zwischen  $0.100 \leq Y_{\text{CO}_2}(t_1) \leq 0.124$  liegt, steigt er durch die offenbar verstärkt ablaufenden Reaktionen auf  $0.126 \leq Y_{\text{CO}_2}(t_2) \leq 0.143$ . Die Maxima liegen in Höhen von  $3.1 \text{ m} \leq x(t_2) \leq 4.1 \text{ m}$ .

### 6.2.4 Rußfelder und Absorptionskoeffizienten

In Abb. 6.11 sind jeweils zwei aufeinanderfolgende transiente Felder des Rußvolumenanteils, die mit dem Rußmodell von Magnussen bzw. dem von Lindstedt vorhergesagt werden, gegenübergestellt. Die Rußvolumenanteile in den beiden Flammen unterscheiden sich deutlich. In der Kerosin-Poolflamme, in der das Magnussen-Modell verwendet wurde, zeigt sich innerhalb der Flamme ein direkter Zusammenhang zwischen dem Rußvolumenanteil und dem



**Abb. 6.10.** Transiente Strömungsfelder, Mischungsbrüche sowie die Massenanteile ausgewählter Spezies in der xy-Ebene der Heptan-Poolflamme mit  $d = 6 \text{ m}$ : (a) Heptan; (b) Kohlenstoffmonoxid; (c) Kohlenstoffdioxid.



**Abb. 6.11.** Transienter Rußvolumenanteil (logarithmische Skalierung) und (a) der Kerosinmassenanteil in der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m bzw. (b) der Acetylenmassenanteil in der Heptan-Poolflamme mit  $d = 6$  m zu jeweils zwei verschiedenen Zeitpunkten in der xy-Ebene.

Kerosinmassenanteil. Die Ursache ist die direkte Abhängigkeit der Rußquellterme vom Brennstoff Kerosin. Sowohl die Bildung als auch die Oxidation des Rußes hängen unmittelbar vom Kerosinmassenanteil und seinem Quellterm ab ( $\rightarrow$  Kap. 4.3.3.1). Das führt aber dazu, dass teilweise in relativ weiten Bereichen der Flamme aufgrund der Abwesenheit des Kerosins keine Rußoxidation erfolgt, obwohl die Temperaturen dort sehr hoch sind. Im unteren Bereich der Flamme ist der Kerosinmassenanteil zum Zeitpunkt  $t = 23$  s bis nahe zur Flam-

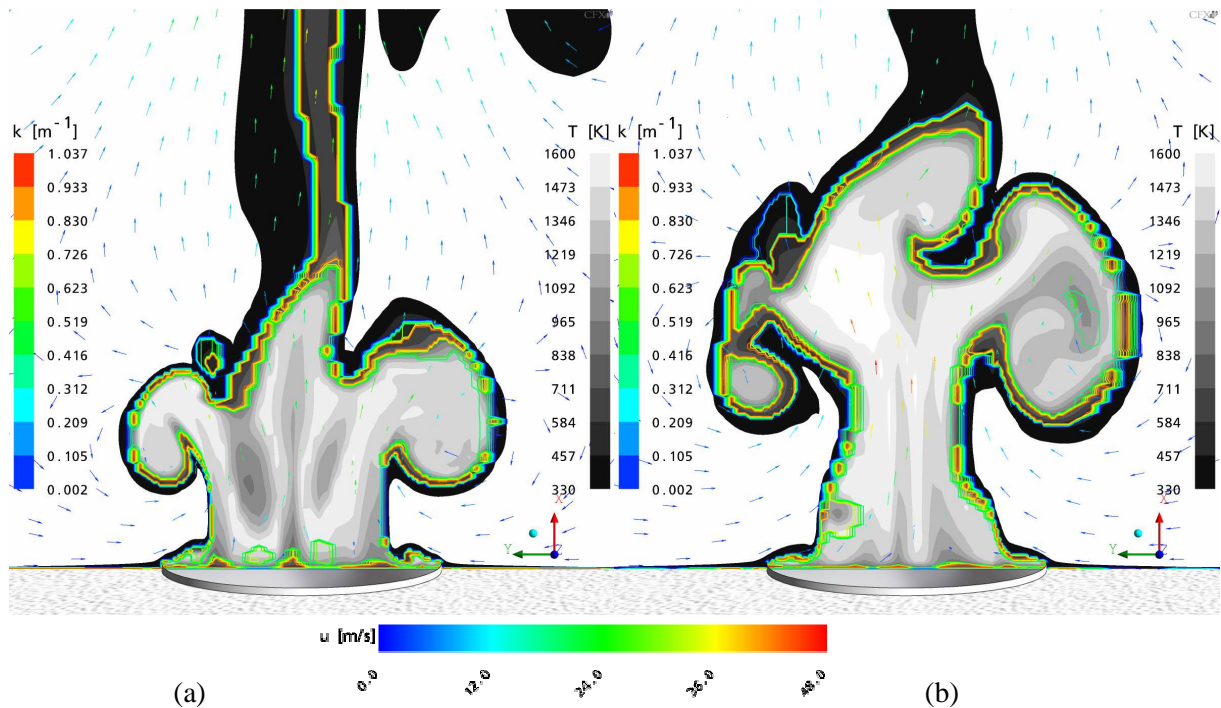


menoberfläche, die sich anhand der Kerosinverteilung oder auch aus den Isothermen in Abb. 6.1 erkennen lässt, sehr hoch. Dementsprechend ist hier auch die Rußproduktionsrate verhältnismäßig hoch. Nimmt nun der Kerosinmassenanteil durch die Reaktion bis zu  $t = 24$  s schnell zum Flammeninnern ab, sinkt in den von der Abnahme betroffenen Bereichen der Rußanteil nicht mehr durch Oxidation ab. Da der Ruß offenbar nicht so schnell abtransportiert wird, wie sich die Flammenoberfläche verschiebt, ist der Rußmassenanteil nun auch außerhalb der Flamme recht hoch. Im Bereich unmittelbar am Poolrand scheinen die Wirbelströmungen weiterhin eine Akkumulation des Rußes zu bewirken. Die Rußpartikel werden durch die Wirbelströmung zurück zum Pool transportiert, wo zeitgleich aber auch auf der Flammen-seite neuer Ruß entsteht. In allen drei Kerosin-Poolflammen wird im zeitlichen Mittel in der unmittelbaren Nähe des Poolrandes ein sehr hoher Rußvolumenanteil außerhalb der Flamme berechnet. Mit ihrem Aufsteigen transportieren die Wirbel einen Teil des Rußes in größere Höhen, was auch dort wesentlich zur Erhöhung des Rußmassenanteils beiträgt.

Das Magnussen-Rußmodell ergibt in den hier betrachteten großen Kerosin-Poolflammen keine sinnvollen Rußvolumenanteile. Das Modell stellt eine Erweiterung des Eddy-Dissipations-Konzepts dar, und wurde an kleinen Flammen mit kurzketigen Brennstoffen wie Acetylen und Wasserstoff validiert [103,104]. Daraus lässt sich folgern, dass die in den kleinen Flammen zugrunde liegenden Prozesse aufgrund der wesentlich anderen Dimensionen von denen in großen Poolflammen abweichen. Insbesondere die Transportvorgänge weisen große Unterschiede auf. In großen Poolflammen treten im Gegensatz zu den kleinen Flammen relativ starke Querströmungen und sogar Strömungen entgegen der Aufstiegsrichtung der heißen Flammengase auf. Außerdem ist das hier betrachtete Kerosin deutlich längerkettiger als die Brennstoffe, auf deren Basis das Modell entwickelt wurde. Da der Reaktionsmechanismus deutlich komplizierter ausfällt, ist eine Beschreibung aller Quellterme in Abhängigkeit vom Ausgangsbrennstoff offenbar nicht ausreichend genau.

Die mit dem Lindstedt-Rußmodell vorhergesagte Rußverteilung in der Heptan-Poolflamme unterscheidet sich grundsätzlich von denen, die mit dem Magnussen-Modell in den Kerosin-Poolflammen berechnet werden. Die Maxima des Rußvolumenanteils überschneiden sich größtenteils mit den Maxima des Massenanteils des Acetylens als Keimbildner. So befindet sich zum Zeitpunkt  $t_1 = 22$  s der Hauptteil des Acetylens in der Nähe der Flammenachse in Höhen von  $3 \text{ m} \leq x(t_1) \leq 14 \text{ m}$ . Dementsprechend wird in diesem Bereich viel Ruß gebildet, die Maxima des Rußvolumenanteils liegen in Höhen von  $7.5 \text{ m} \leq x(t_1) \leq 14 \text{ m}$ . Zum Zeitpunkt  $t_2 = 23$  s sind die Anteile der beiden Größen in diesem Bereich durch Reaktionen und Konvektion stark verringert worden. Die Maxima liegen nun hauptsächlich in Höhen  $0.1 \text{ m} \leq x(t_2) \leq 4.5 \text{ m}$ , sind aber nicht mehr auf die Flammenachse begrenzt, sondern in positiver wie negativer  $y$ -Richtung deutlich breiter verteilt.

In der Heptanflamme treten in der Rußverteilung in einem zeitlich und räumlich variablen Abstand von der Flammenmitte sehr hohe Gradienten auf, der Rußvolumenanteil tendiert dann fast sprunghaft gegen Null. Somit lässt sich die Flamme anhand des Rußes, anders als bei den Simulationen der Kerosin-Poolflammen, eindeutig von der Umgebung unterscheiden. Der Übergang von der Flamme zur Umgebung ist im Einklang mit den Flammenkonturen, die sich aus dem Temperaturfeld ( $\rightarrow$  Abb. 6.4) oder auch dem Kohlenstoffdioxidmassenanteil ( $\rightarrow$  Abb. 6.10) ablesen lassen. Mit dem Lindstedt-Rußmodell wird also die Rußverteilung in

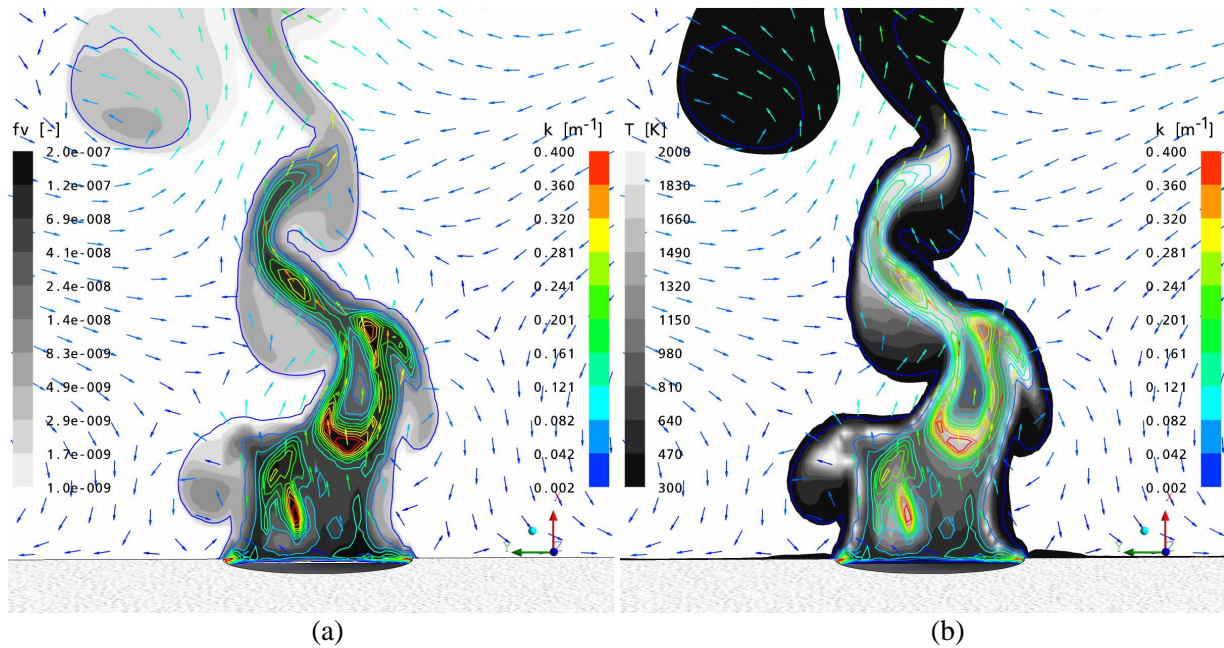


**Abb. 6.12.** Momentane Felder des Absorptionskoeffizienten  $k$  sowie der Temperatur (Werte unterhalb 330 K nicht dargestellt) in der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m zu zwei verschiedenen Zeitpunkten: (a)  $t_1 = 23$  s; (b)  $t_2 = 24$  s.

der Heptan-Poolflamme in Abhängigkeit von Zeit und Ort variabel und plausibel vorhergesagt.

Da die Rußverteilung in den simulierten Kerosin-Poolflammen nicht gut wiedergegeben werden kann, wäre eine Abhängigkeit des Absorptionskoeffizienten  $k$  vom berechneten Rußvolumenanteil  $f_v$  nicht sinnvoll. In Abb. 6.12 sind die Absorptionskoeffizienten für zwei aufeinanderfolgende Zeitpunkte dargestellt, die stattdessen in Abhängigkeit von der Temperatur ( $\rightarrow$  Kap. 5.4.4.1) berechnet sind. Es zeigt sich, dass die Maxima des Absorptionskoeffizienten in der Nähe der Flammenoberfläche vorliegen. Experimente zeigen, dass an der Flammenoberfläche großer Kerosin-Poolflammen dunkle Rußballen vorliegen, in denen der Rußvolumenanteil sehr hoch ist. Gemäß Gl. (5.6) bewirkt der hohe Rußvolumenanteil eine deutliche Anhebung des Absorptionskoeffizienten  $k$ . Die berechnete Verteilung des Absorptionskoeffizienten ist also im Einklang mit den experimentellen Beobachtungen und der mathematischen Beziehung zwischen  $k$  und  $f_v$ . Mit der Sprungfunktion, die die drei kohärenten Strukturen hot spot, Rußballen und Reaktionszone berücksichtigt sowie die Luft als diatherm betrachtet, werden in der Abschätzung jedoch nur vier Abstufungen erhalten. Dennoch stellt sie in großen Poolflammen eine brauchbare Alternative zur Berechnung des Absorptionskoeffizienten über Gl. (5.6) dar, wenn die Rußverteilung in der Flamme nicht bekannt ist.

Der Vergleich der transienten Absorptionskoeffizienten mit der Rußverteilung in der Heptan-Poolflamme ( $\rightarrow$  Abb. 6.13a) zeigt, dass die Lage der Maxima der beiden Feldgrößen identisch ist. Demgegenüber treten die Maxima des Kohlenstoffdioxidmassenanteils, als einem Beispiel für die absorbierenden Gasspezies, teilweise dort auf, wo der Absorptionskoeffizient sehr geringe Werte annimmt ( $\rightarrow$  Abb. 6.10). Demnach wird der Absorptionskoeffizient



**Abb. 6.13.** Momentane Absorptionskoeffizienten  $k$  in der Heptan-Poolflamme mit  $d = 6$  m zum Zeitpunkt  $t_1 = 23$  s sowie: (a) Rußvolumenanteil  $f_v$ ; (b) Transientes Temperaturfeld (Temperaturen unterhalb 300 K nicht dargestellt).

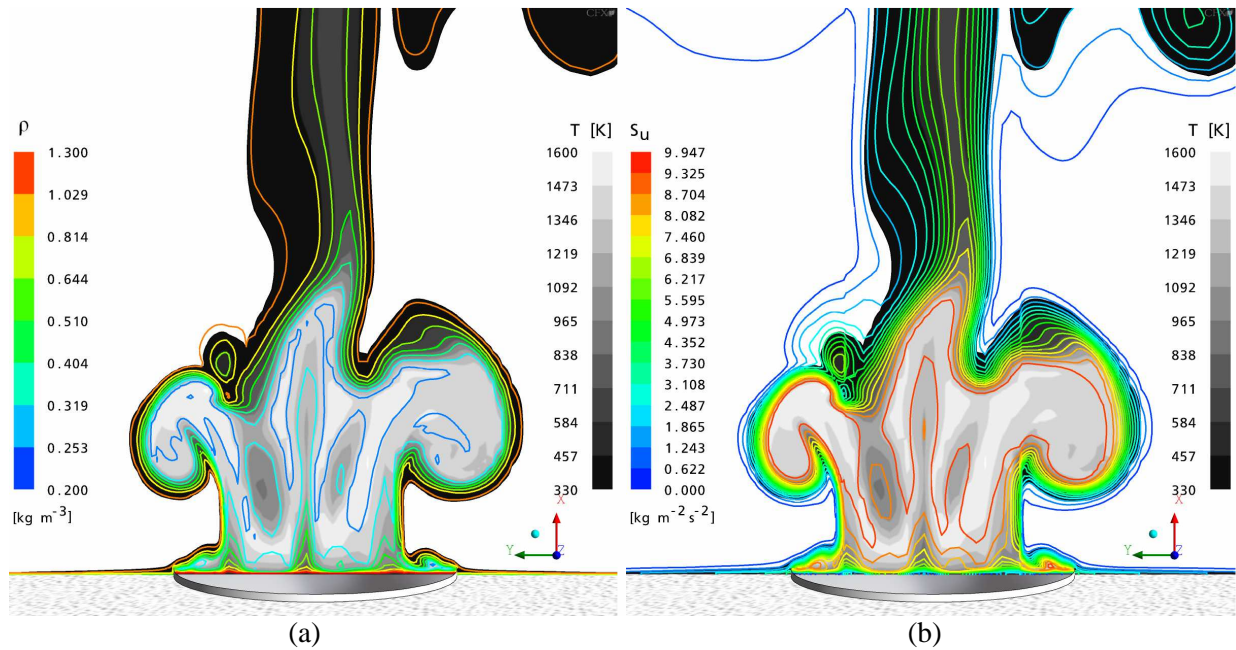
maßgeblich durch den Rußvolumenanteil bestimmt. Die Absorption der Gasspezies trägt nur zu einem geringen Teil zur gesamten Absorption bei.

Der Vergleich der Rußverteilung mit dem Temperaturfeld in Abb. 6.13b zeigt, dass in Bereichen, in denen sehr hohe Temperaturen vorliegen, der Rußvolumenanteil niedriger ausfällt. Die hohen Temperaturen führen bei Verwendung des Lindstedt-Rußmodells offensichtlich zu höheren Rußoxiderationsraten. Das Modell gibt somit eine gute quantitative Beschreibung der ablaufenden Oberflächenreaktionen.

Da der Rußvolumenanteil in den sehr heißen Flammenbereichen um bis zu zwei Zehnerpotenzen abnimmt, bewirkt das trotz der höheren Temperatur, die ebenfalls in die Berechnung des Absorptionskoeffizienten gemäß Gl. (5.6) eingeht, eine deutliche Abnahme von  $k_s$ . Dadurch wird die Zu- bzw. Abnahme des Absorptionskoeffizienten bei bestimmten Schwellenwerten der Temperatur, die in den Kerosin-Poolflammen festgelegt wurde, qualitativ bestätigt.

### 6.2.5 Dichtefelder und Auftriebskräfte

Zur Berechnung der Dichte wird die Zustandsgleichung idealer Gase ( $\rightarrow$  Gl. (4.16)) herangezogen. Ein sehr entscheidender Einflussfaktor auf die Dichte ist daher die Temperatur. Dieser Zusammenhang wird in Abb. 6.14a dargestellt. In der hier wie bereits in den vorigen Kapiteln gewählten Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m treten zum Zeitpunkt  $t_1 = 23$  s die höchsten Temperaturen und folgerichtig die niedrigsten Dichten in der Nähe der Flammenachse sowie in den Wirbelbereichen an der Flammenoberfläche bei etwa  $x(t_1) \approx 10$  m auf. Die Auftriebskraft  $S_u$ , dargestellt in Abb. 6.14b, ist wiederum unmittelbar mit der Dichte über Gl. (4.8) verknüpft. Die Flammengase erfahren daher die höchsten Beschleunigungen in den Bereichen



**Abb. 6.14.** Transientes Temperaturfeld einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m zum Zeitpunkt  $t = 23$  s sowie die Verteilung der (a) Dichte bzw. der (b) Auftriebskräfte.

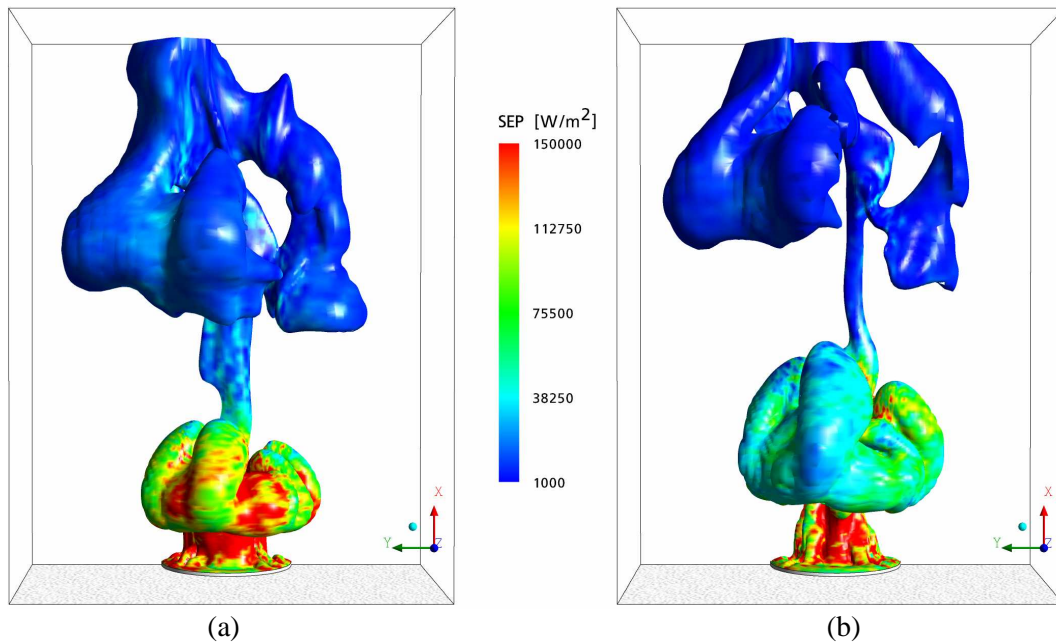
der Temperaturmaxima bzw. der Dichteminima. Die relativ hohen Temperaturen in den Wirbeln sind also die Ursache für deren Auftriebskraft. Wie in den vorigen Kapiteln diskutiert, nehmen der Kerosinmassenanteil und dadurch die Reaktionsgeschwindigkeiten ( $\rightarrow$  Kap. 6.2.3) und Temperaturen ( $\rightarrow$  Kap. 6.2.1) mit zunehmender Lebensdauer des Wirbels ab. Folglich verringert sich auch zunehmend die Auftriebskraft, die zur Aufrechterhaltung der Wirbelströmung erforderlich ist. Durch Impulsaustausch mit der Umgebung wird der Wirbel dann kontinuierlich abgeschwächt, bis er sich schließlich vollständig auflöst.

### 6.2.6 Spezifische Ausstrahlung

Wie der englische Begriff *surface emissive power* (SEP) offenbart, ist die spezifische Ausstrahlung auf die Oberfläche der Flamme bezogen. Die Lösung der in Kap. 4.3.4 beschriebenen Bilanzgleichungen ergibt den Strahlungsfluß, der über die einzelnen Zelloberflächen des Rechengitters erfolgt. Zur Bestimmung der SEP muss also bekannt sein, welche Zellen an der Flammenoberfläche liegen. Daher muss zunächst für die hier berechneten Poolflammen ein Kriterium festgelegt werden, das die zeitabhängige Lage der Flammenoberfläche definiert. Die Bestimmung über die sichtbare Flammenkontur, wie in Experimenten oftmals üblich, ist im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich, da die Strahlung nicht in Abhängigkeit von der Wellenlänge berechnet wird. In den modellierten Flammen können aber beispielsweise ein konstanter Massenanteil einer bestimmten Spezies bzw. des Rußes, ein grenzwertiger Absorptionskoeffizient oder auch die Temperatur des Ruß-Gasgemisches zur Festlegung der Oberfläche herangezogen werden.

Da in den berechneten Kerosin-Poolflammen der Massenanteil des Kerosins vom Flammeninnern nach außen sehr schnell abnimmt ist die Bestimmung über eine festen Brennstoffmas-





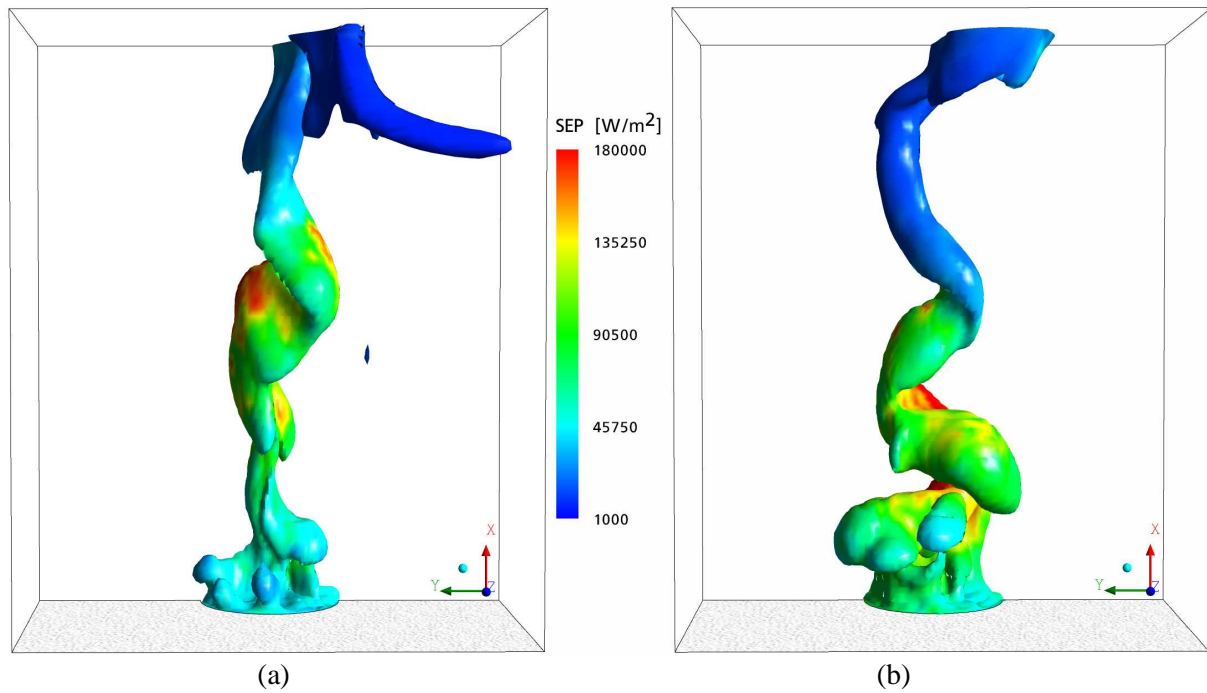
**Abb. 6.15.** Spezifische Ausstrahlung  $SEP(x,y,z,t)$  einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m auf einer Isofläche mit  $Y_{O_2} = 0.22$  zu zwei verschiedenen Zeitpunkten: (a)  $t_1 = 23$  s; (b)  $t_2 = 24$  s.

senanteil hier nicht sinnvoll. Daher wird die Flammenoberfläche gleich der Fläche gesetzt, auf der der Sauerstoffmassenanteil der Umgebungsluft unterschritten wird. In Abb. 6.15 sind die so definierten Flächen und die von ihnen ausgehenden spezifischen Wärmestrahlungen exemplarisch anhand der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m zu zwei verschiedenen Zeitpunkten dargestellt. Die Flächen zeigen je nach Ort und Zeitpunkt eine deutlich variable spezifische Ausstrahlung. Während in geringen Höhen von etwa  $x/d \leq 0.5$  über der Pooloberfläche fast durchgängig sehr hohe Werte von bis zu  $SEP_{\max} = 150 \text{ kW/m}^2$  vorliegen, ist die spezifische Ausstrahlung in Höhen von ca.  $x/d \geq 2$  mit  $1 \text{ kW/m}^2 \leq SEP \leq 20 \text{ kW/m}^2$  vergleichsweise gering. In den Bereichen dazwischen wird die Strahlung maßgeblich von den aufsteigenden Wirbeln bestimmt. Dabei ist eine Abnahme der spezifischen Ausstrahlung mit zunehmender Höhe und Ausdehnung der Wirbel zu beobachten. Durch die gewählte Methode ist also gewährleistet, dass die auch im Experiment ( $\rightarrow$  Kap. 3.3 und [36,86,122]) gefundenen, räumlich und zeitlich stark schwankenden spezifischen Ausstrahlungen erfasst werden.

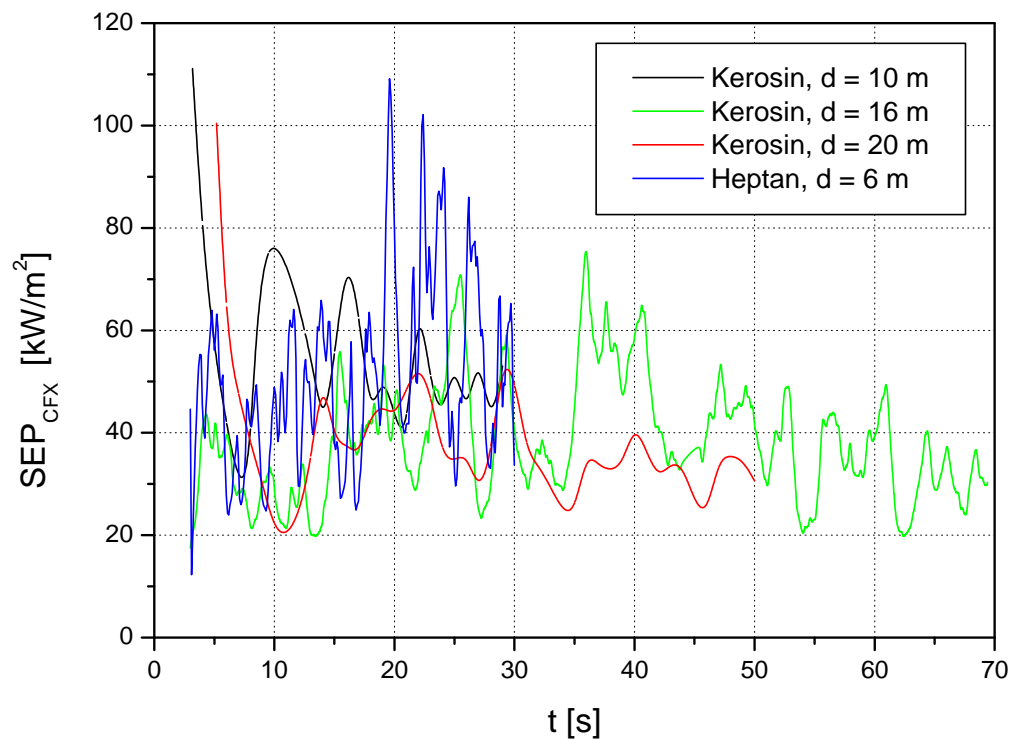
In der Simulation der Heptan-Poolflamme stehen aufgrund des verwendeten Flamelet-Modelles mehr Variable zur Festlegung der Flammenoberfläche zur Verfügung. Es wäre beispielsweise denkbar, für den Grenzwert einen sehr niedrigen Massenanteil des Kohlenstoffmonoxids festzusetzen, da das CO vergleichsweise langsam reagiert und bei einem Wert nahe Null die Flammenreaktionen als abgeschlossen angesehen werden können. Um einen einheitlicheren Vergleich mit den simulierten Kerosinflammen zu gewährleisten, ist in Abb. 6.16 jedoch ebenfalls eine Isofläche mit einem konstanten Sauerstoffmassenanteil dargestellt. Eine Gegenüberstellung von den berechneten zeitlichen Mittelwerten der spezifischen Ausstrahlungen, die auch über andere Grenzwerte bestimmt wurden, sowie von experimentell ermittelten Werten erfolgt in Kap. 6.7

Die in der Heptan-Poolflamme bestimmten spezifischen Ausstrahlungen unterscheiden sich etwas von denen in den Kerosin-Poolflammen. Da in der Heptanflamme die maximalen Tem-





**Abb. 6.16.** Spezifische Ausstrahlung  $SEP(x,y,z,t)$  einer Heptan-Poolflamme mit  $d = 6$  m auf einer Isofläche mit  $Y_{O_2} = 0.22$  zu zwei verschiedenen Zeitpunkten: (a)  $t_1 = 22$  s; (b)  $t_2 = 23$  s.



**Abb. 6.17.** Zeitlicher Verlauf der berechneten spezifischen Ausstrahlungen  $SEP$ .

peraturen nicht unmittelbar über dem Pool auftreten, werden hier auch nicht die Strahlungsmaxima erreicht sondern erst in Höhen über  $x/d > 0.5$ . Die spezifische Ausstrahlung ist aber ebenso wie in den Kerosin-Poolflammen sowohl örtlich als auch zeitlich sehr hohen Schwankungen unterworfen.

Der zeitliche Verlauf des Flächenmittels der in den vier simulierten Flammen berechneten spezifischen Ausstrahlungen ist in Abb. 6.17 dargestellt. Das Diagramm verdeutlicht, dass das Pulsieren der Flamme zu zeitlich großen Schwankungen der berechneten SEP führt. Die maximale spezifische Ausstrahlung der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m ist beispielsweise mit  $SEP_{\max} = 54.7 \text{ kW/m}^2$  um den Faktor 1.5 größer als der ab  $t = 20$  s zeitlich gemittelte Wert von  $\overline{SEP} = 36 \text{ kW/m}^2$ . Im Fall der Heptanflamme ist der Unterschied bei Werten von  $SEP_{\max} = 109.2 \text{ kW/m}^2$  und  $\overline{SEP} = 56.3 \text{ kW/m}^2$  und dem Faktor 1.9 noch deutlicher. Der temporäre Anstieg der spezifischen Ausstrahlung hat unmittelbaren Einfluss auf die Bestrahlungsstärke auf umstehende Personen und angrenzende Objekte und ist daher von großem sicherheitstechnischem Interesse. Details werden im folgenden Kapitel erörtert.

### 6.3 Transiente Bestrahlungsstärken

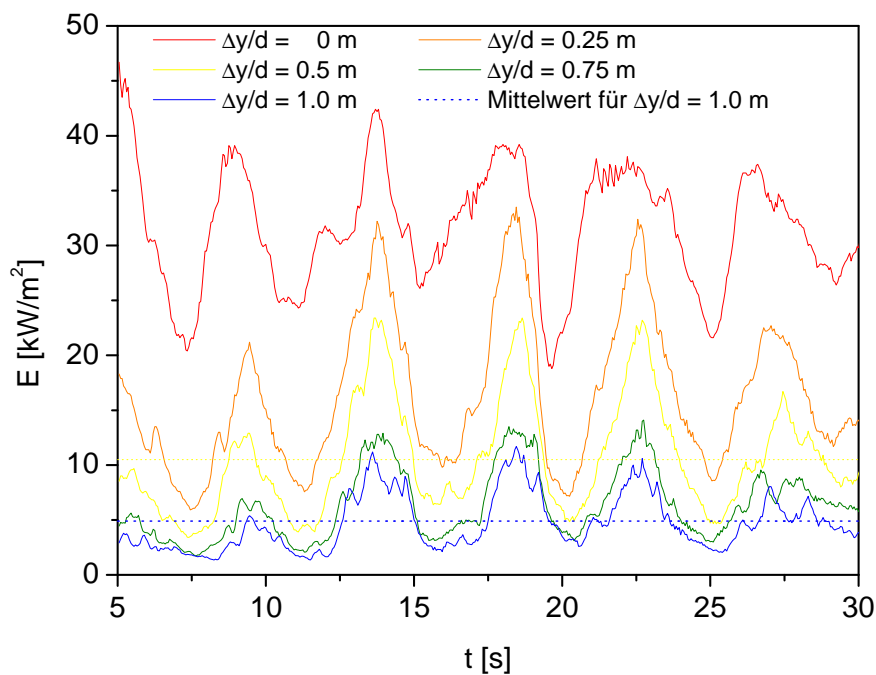
In der Sicherheitstechnik nimmt die Bestrahlungsstärke einen wichtigen Stellenwert ein. Durch die auf ein Objekt treffende Strahlung kann es bei ausreichender Intensität und Dauer zur Selbstentzündung und Folgebränden kommen. Beim Menschen kann die auftreffende Strahlung je nach Intensität schon bei kürzerer Einwirkungsdauer zu Schmerzen, Schäden oder sogar zum Tod führen. Tab. 6.1 zeigt einige kritische Bestrahlungsstärken auf die menschliche Haut.

In Abb. 6.18 sind die in der Simulation der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m in einer Höhe von  $x = 1.5$  m berechneten momentanen Bestrahlungsstärken für verschiedene relative Abstände zum Poolrand in Abhängigkeit von der Zeit aufgetragen. Wie sich zeigt, hängt die auf ein Objekt auftreffende Strahlung stark von der Entfernung zur Strahlungsquelle und vom Zeitpunkt ab. Mit zunehmendem relativen Abstand  $\Delta y/d$  nimmt z.B. die maximale Bestrahlungsstärke  $E_{\max}(\Delta y/d)$  von  $E_{\max}(0) \approx 42 \text{ kW/m}^2$  über  $E_{\max}(0.5) \approx 23 \text{ kW/m}^2$  zu  $E_{\max}(1) \approx 11 \text{ kW/m}^2$  stark ab. Bei konstantem Abstand treten im zeitlichen Verlauf sehr hohe Schwankungen auf. Das Maximum für  $\Delta y/d = 0$  beispielsweise liegt bei  $E_{\max} \approx 42 \text{ kW/m}^2$ , das Minimum mit  $E_{\min} \approx 19 \text{ kW/m}^2$  ist weniger als halb so groß. Für die Festlegung von thermischen Gefahrenabständen bzw. die Dauer des gefahrlosen Aufenthalts von Menschen in einem festen Abstand zur Flamme sind solche Schwankungen zu berücksichtigen. Es treten beispielsweise in einer relativen Entfernung von  $\Delta y/d = 1$  regelmäßig Maxima von  $E_{\max} \approx 10 \text{ kW/m}^2$  auf. Während die mittlere Bestrahlungsstärke dieser Poolflamme im gleichen Abstand mit  $\overline{E}(1) = 4.9 \text{ kW/m}^2$  ( $\rightarrow$  Kap. 6.8) nach Tab. 6.1 noch knapp im tolerierbaren Bereich liegt, können die Strahlungsmaxima Verbrennungen 1. Grades verursachen. Die maximale Bestrahlungsstärke  $E_{\max}$  wird zwar meist nur für eine sehr kurze Zeitdauer erreicht. In der Regel erfolgt die Überschreitung des Mittelwertes, der rasche Anstieg auf ein temporäres Maximum und die anschließende Absenkung auf ein temporäres Minimum über einen Zeitraum von  $2 \text{ s} \leq \Delta t \leq 4 \text{ s}$ . Diese Dauer reicht aus, um Verletzungen an ungeschützten Personen hervorzurufen, da die kritische Einwirkungsdauer  $\tau_{\text{cr}} \approx 3 \text{ s}$  beträgt. Für technisch

**Tab. 6.1.** Kritische Bestrahlungsstärken  $\bar{E}_{cr}$  auf die menschliche Haut [130,131].

Einfluss auf die Haut	Kritische Einwirkungs- dauer $\tau_{cr}$ [s]	Kritische Bestrahlungsstärke $\bar{E}_{cr}$ [kW/m <sup>2</sup> ]
maximal zulässig für ungeschützte Haut (Solar- konstante)	$\infty$	1.3
Schmerz tolerierbar	$< 20$	4
	$< 13$	5
Verbrennung 1. Grades	$> 8$	6.4
	$\approx 3$	10.4
Verbrennung 2. Grades, Blasenbildung	$> 16$	10.5
	$> 10$	16
Tödliche Schwelle	$\approx 40$	10

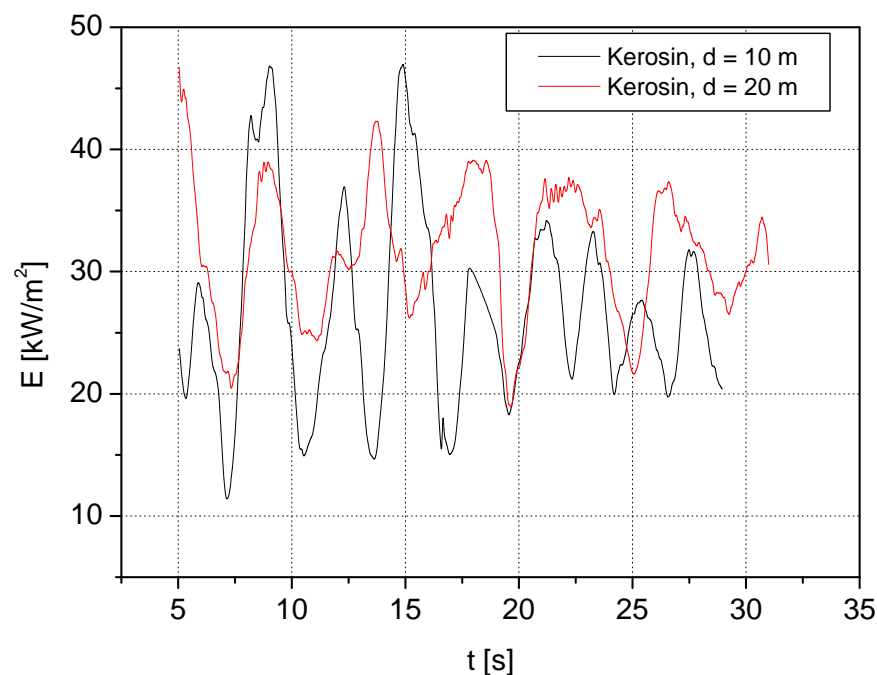
wichtige Schutzobjekte sind diese kurzzeitigen Maxima jedoch nicht von Bedeutung, da hier die kritische Einwirkungsdauer in der Regel deutlich länger ist. In Abb. 6.19 sind die berechneten Verläufe der momentanen Bestrahlungsstärken für zwei Kerosin-Poolflammen in einem radialen Abstand von  $\Delta y/d = 0$  dargestellt. Beide berechneten Verläufe spiegeln die Dynamik der Flammen wieder. Da durch das Pulsieren der Flammen die spezifischen Ausstrahlungen  $SEP(t)$  regelmäßigen Intensitätsänderungen unterworfen sind, ergeben sich auch an den virtuellen Empfänger-elementen deutlich voneinander abweichende Maxima und Minima der Bestrahlungsstärke  $E(t)$ . Diese zeitlichen Änderungen von  $E(t)$  werden durch experimentelle

**Abb. 6.18.** Verlauf der berechneten Bestrahlungsstärke  $E$  in einer Höhe  $x = 1.5$  m für verschiedene Abstände  $\Delta y/d$  von einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m.

Ergebnisse verschiedener Arbeitsgruppen bestätigt [7,36,86,51,122,132-133].

## 6.4 Pulsationsfrequenzen

Die in den vorigen Kapiteln anhand der transienten Felder von z.B. der Temperatur oder Strömungsgeschwindigkeit beschriebene Pulsation der Flamme soll hier quantitativ beurteilt werden. Experimentell wird die Pulsationsfrequenz einer Flamme in der Regel mit optischen Methoden ermittelt. Dazu wird beispielsweise die Ausbauchung und anschließende Einschnürung der Flamme anhand der sichtbaren Rußballen in einer festen Höhe in Abhängigkeit von der Zeit registriert [24]. In nicht rußenden Flammen kann die Frequenz über die Geschwindigkeitsänderungen von Tracer-Partikeln an einem festen Punkt mit Hilfe der Particle Image Velocimetry bestimmt werden [134,135]. Im Rahmen dieser Arbeit wird das zyklische Zusammenziehen und Ausdehnen der Flammenkontur über die Temperatur bestimmt. Dazu wird die Tatsache ausgenutzt, dass innerhalb der Wirbel eine deutlich höhere Temperatur vorliegt als in ihrer unmittelbaren Umgebung. Das Aufsteigen der Wirbel, deren Ursprung am Poolrand liegt, führt daher, wie in Kap. 6.2.1 gezeigt, zur kurzzeitigen Ausbauchung des Temperaturfeldes. Wird nun der Verlauf der Temperatur an einer geeigneten ortsfesten Position verfolgt, werden vorbeiziehende Wirbel zu einer deutlichen Schwankung der Temperatur an dieser Stelle führen. Die Bestimmung der Pulsationsfrequenz erfolgt, indem die Anzahl der Temperaturmaxima durch den Zeitraum, in dem sie auftreten, geteilt wird. Diese Methode wird auch in der Literatur beschrieben, dort wird jedoch oftmals anstelle der Temperatur die Strömungsgeschwindigkeit verfolgt [136,134,135]. Bei dieser Methode muss sichergestellt werden, dass die Schwankungen möglichst nur durch den Einfluss der äußeren Wirbel hervorgerufen werden. Ausgehend von der Flammenachse wird dazu in den Kerosinflammen



**Abb. 6.19.** Verlauf der berechneten momentanen Bestrahlungsstärken  $E$  in einer Höhe  $x = 1.5$  m im Abstand von  $\Delta y/d = 0$  für Kerosin-Poolflammen unterschiedlicher Durchmesser.

eine Koordinate zwischen  $0.25 \leq x/d \leq 0.5$  und  $0.25 \leq y/d \leq 0.35$  gewählt. Die zur Frequenzbestimmung herangezogenen Temperaturverläufe sind in den Abb. 6.20 bis Abb. 6.23 dargestellt. Wird der Temperaturverlauf z.B. in geringerem Abstand von der Flammenachse verfolgt, ist er wesentlich unregelmäßiger und die Maxima können nicht mehr eindeutig der nach außen sichtbaren Pulsation zugeordnet werden. Die teilweise leicht unregelmäßig auftretenden Schwankungen (s.u.) führen in Verbindung mit der begrenzten Anzahl von Datenpunkten dazu, dass mit mathematischen Methoden wie z.B. der Fast Fourier Transformation keine eindeutigen Frequenzen bestimmt werden können.

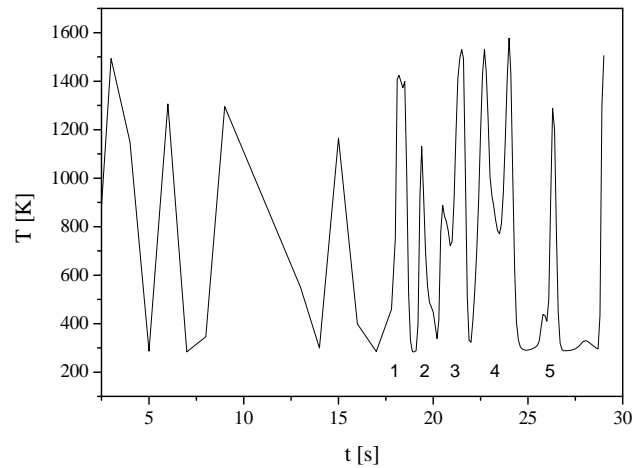
In Abb. 6.20 ist der Temperaturverlauf an der Koordinate  $x/d = 0.3$ ,  $y/d = 0.3$ ,  $z/d = 0.0$  innerhalb einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 10$  m dargestellt. Zusätzlich sind die zur Frequenzbestimmung herangezogenen Temperaturpeaks nummeriert. Bereits nach 3 Sekunden ist ein erstes Temperaturmaximum von  $T = 1493$  K erreicht. Die Zählung wird jedoch erst mit dem Maximum von  $T = 1423$  K zum Zeitpunkt  $t = 18.2$  s begonnen, da die Flamme erst ab etwa  $t \approx 15$  s voll ausgebildet ist. Aus diesem Grund ist der Temperaturverlauf bis zu  $t = 15$  s auch nur sekundengenau aufgelöst, was insbesondere den breiten Peak um  $t = 10$  s erklärt. Danach wird die Temperatur zu jeder Zehntelsekunde ausgelesen. Der für die Auswertung relevante Zeitraum wird über die beiden Zeitpunkte unmittelbar vor den Temperaturanstiegen des ersten und des letzten gezählten Peaks definiert. Aus dem Zeitraum von  $\Delta t = 11.7$  s und den fünf Peaks, die jeweils einen aufsteigenden Wirbel repräsentieren, ergibt sich eine Pulsationsfrequenz der Flamme von  $f(d = 10 \text{ m}) = 0.43$  Hz.

Die nähere Betrachtung von Abb. 6.20 bis Abb. 6.22 offenbart die Problematik dieser Methode. Durch die zeitlich variable Kontur eines vorbeiziehenden Wirbels kann an dem betrachteten Ort die Temperatur in sehr kurzer Zeit abfallen und wieder ansteigen. Einige Temperaturmaxima, die einem einzigen Wirbel zugeordnet werden, ließen sich auch in zwei oder mehr Peaks unterteilen. Die Zuordnung der Peaks zu den Wirbeln erfolgt jedoch unter Beachtung des Effektes, dass zwischen den einzelnen Wirbeln kalte Außenluft angesaugt wird und dadurch die Temperatur auf ein Minimum von ca. 300 K abfällt. Die sehr nah beieinander liegenden Doppel- bzw. Mehrfachpeaks könnten ein Grund dafür sein, dass mit der Fast Fourier Transformation keine eindeutigen Frequenzen bestimmt werden.

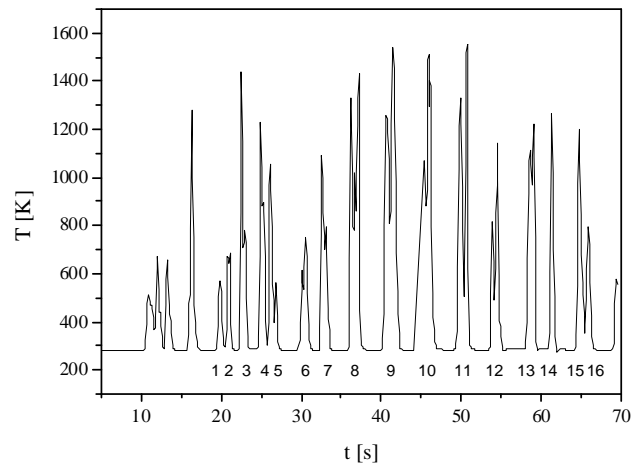
Im Temperaturverlauf an der Koordinate  $x/d = 0.50$ ,  $y/d = 0.25$ ,  $z/d = 0.0$  innerhalb der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 16$  m wird die Zuordnung der Temperaturmaxima zu einzelnen Wirbelstrukturen zusätzlich erschwert. Hier treten nicht nur die Doppelpeaks auf, sondern es liegen zusätzlich einige Peaks zweier aufeinander folgender Wirbel sehr dicht beieinander. Das führt beispielsweise dazu, dass zwischen den Wirbeln 15 und 16 die Temperatur nicht ganz so deutlich abfällt wie zwischen den Anderen. Außerdem wird verdeutlicht, dass die Zeiträume zwischen den einzelnen Maxima nicht identisch sind sondern leicht variieren. Aus den 16 Wirbeln in einem Zeitintervall von  $\Delta t = 49.3$  s ergibt sich insgesamt eine Frequenz von  $f(d = 16 \text{ m}) = 0.32$  Hz.

Die Auswertung des Temperaturverlaufes der Kerosin-Poolflamme mit einem Pooldurchmesser von  $d = 20$  m erfolgt am Punkt  $x/d = 0.25$ ,  $y/d = 0.35$ ,  $z/d = 0.0$  ab dem Zeitpunkt  $t = 21.0$  s. In einem Zeitraum von  $\Delta t = 25$  s ergibt sich eine Frequenz von  $f(d = 20 \text{ m}) = 0.28$  Hz.

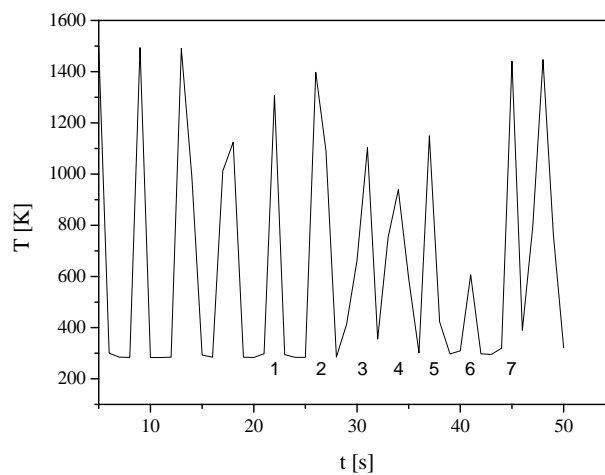
Die Bestimmung der Pulsationsfrequenz der Heptan-Poolflamme erfolgt über den Temperaturverlauf am Punkt  $x/d = 0.06$ ,  $y/d = 0.42$ ,  $z/d = 0.0$  ab dem Zeitpunkt  $t = 16.5$  s. In einem



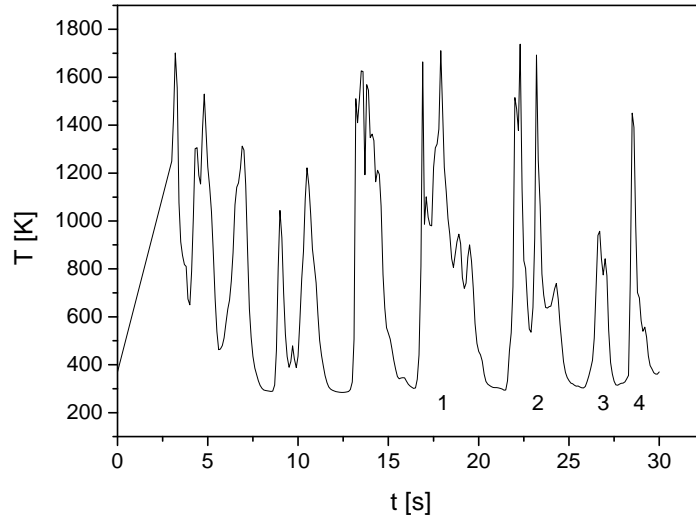
**Abb. 6.20.** Temperaturverlauf am Punkt  $x/d = 0.3$ ,  $y/d = 0.3$ ,  $z/d = 0.0$  in einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 10$  m. Die nummerierten Peaks werden als Wirbel für die Frequenzbestimmung gewertet.



**Abb. 6.21.** Temperaturverlauf am Punkt  $x/d = 0.50$ ,  $y/d = 0.25$ ,  $z/d = 0.0$  in einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 16$  m. Die nummerierten Peaks werden als Wirbel für die Frequenzbestimmung gewertet.



**Abb. 6.22.** Temperaturverlauf am Punkt  $x/d = 0.25$ ,  $y/d = 0.35$ ,  $z/d = 0.0$  in einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m. Die nummerierten Peaks werden als Wirbel für die Frequenzbestimmung gewertet.



**Abb. 6.23.** Temperaturverlauf am Punkt  $x/d = 0.375$ ,  $y/d = 0.375$ ,  $z/d = 0.0$  in einer Heptan-Poolflamme mit  $d = 6$  m. Die nummerierten Peaks werden als Wirbel für die Frequenzbestimmung gewertet.

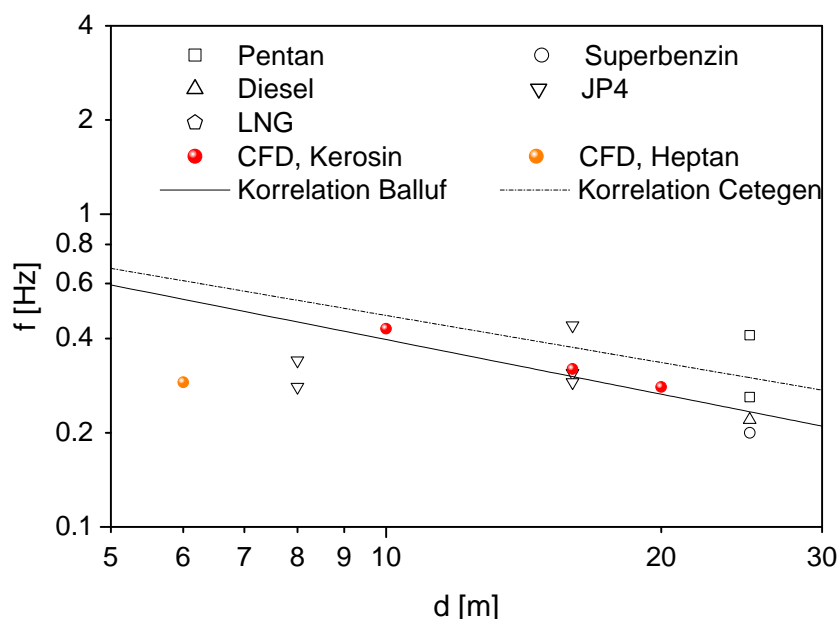
Zeitintervall von  $\Delta t = 25$  s ergibt sich eine Frequenz von  $f(d = 20 \text{ m}) = 0.28$  Hz.

Die Bestimmung der Pulsationsfrequenz der Heptan-Poolflamme erfolgt über den Temperaturverlauf am Punkt  $x/d = 0.06$ ,  $y/d = 0.42$ ,  $z/d = 0.0$  ab dem Zeitpunkt  $t = 16.5$  s. In einem Zeitraum von  $\Delta t = 13.5$  s werden 4 Peaks registriert, was einer Frequenz von  $f(d = 6 \text{ m}) = 0.29$  Hz entspricht.

Die Gegenüberstellung der bestimmten Pulsationsfrequenzen in Tab. 6.2 verdeutlicht, dass mit einer Vergrößerung des Pooldurchmessers eine Erniedrigung der Frequenz einhergeht. Lediglich die Frequenz der Heptan-Poolflamme bildet eine Ausnahme, sie ist fast identisch mit der Frequenz der größten simulierten Kerosinflamme. Die Gegenüberstellung der ermittelten Frequenzen und den auf Experimenten basierenden Korrelationen von Balluf [24] und Cetegen [25] zeigt für die Kerosin-Poolflammen eine sehr gute Übereinstimmung ( $\rightarrow$  Abb. 6.24). Die berechnete Frequenz der Heptan-Poolflamme weicht allerdings von den Korrelationen ab, die absolute Abweichung erscheint zunächst recht deutlich. Dadurch, dass jedoch auch die abgebildeten experimentellen Ergebnisse eine Streuung um die Korrelationen aufweisen, wird die Abweichung aus der Simulation der Heptanflamme etwas relativiert.

**Tab. 6.2.** Ermittelte Pulsationsfrequenzen der verschiedenen Flammen.

Brennstoff	d [m]	Zeitraum		f [1/s]
		$t_1$ [s]	$t_2$ [s]	
Kerosin	10	17.0	28.7	0.43
Kerosin	16	19.5	68.8	0.32
Kerosin	20	21.0	46.0	0.28
Heptan	6	13.6	28.2	0.29



**Abb. 6.24.** Gegenüberstellung der aus den verschiedenen Simulationen ermittelten Pulsationsfrequenzen mit Experimenten [24,22] und Korrelationen von Balluf [24] sowie der Korrelation von Cetegen [25].

Insgesamt zeigen die Ergebnisse, dass die Dynamik von Poolflammen mit den Methoden der numerischen Strömungsmechanik realistisch wiedergegeben werden kann. Die leichten Variationen der Zeiträume zwischen den einzelnen Wirbeln spiegelt deren turbulente Eigenschaften wieder. Sie sind nicht vollkommen symmetrische Strukturen und steigen daher auch nicht mit identischen Geschwindigkeiten in absolut gleichen Zeitintervallen auf. Im zeitlichen Mittel ist jedoch eine deutliche Abhängigkeit der Pulsationsfrequenz vom Pooldurchmesser gegeben.

## 6.5 Zeitlich gemittelte Felder

In den vorangegangenen Kapiteln wurde ausführlich die Dynamik der Flamme besprochen. Zum Vergleich der Felder und Größen verschiedener Flammen mit den Messergebnissen sind die momentanen Werte zu einem willkürlichen Zeitpunkt jedoch meist nur bedingt geeignet. In den folgenden Kapiteln erfolgt daher eine Gegenüberstellung von experimentellen und numerischen Ergebnissen anhand von zeitlich gemittelten Feldern, Profilen und Größen. Die Simulationen beginnen jeweils zum Zeitpunkt  $t = 0$  s mit der Zündung des Brennstoffes. Die Flammen wachsen mit zunehmender Zeit kontinuierlich an, bis sie sich nach etwa 15 bis 20 s voll ausgebildet haben. Die zeitliche Mittelwertbildung erfolgt daher ab  $t = 20$  s für die Kerosin-Poolflammen bzw. bei  $t = 15$  s für die deutlich kleinere Heptan-Poolflamme und endet mit dem Zeitpunkt am Ende der jeweiligen Simulation ( $\rightarrow$  Tab. 5.1).

### 6.5.1 Temperaturfelder

In Abb. 6.25 sind die zeitlich gemittelten Temperaturfelder in der  $xy$ -Ebene der verschiedenen Simulationen dargestellt. Zum einfacheren Vergleich ist die Darstellung der rotationssymmet-



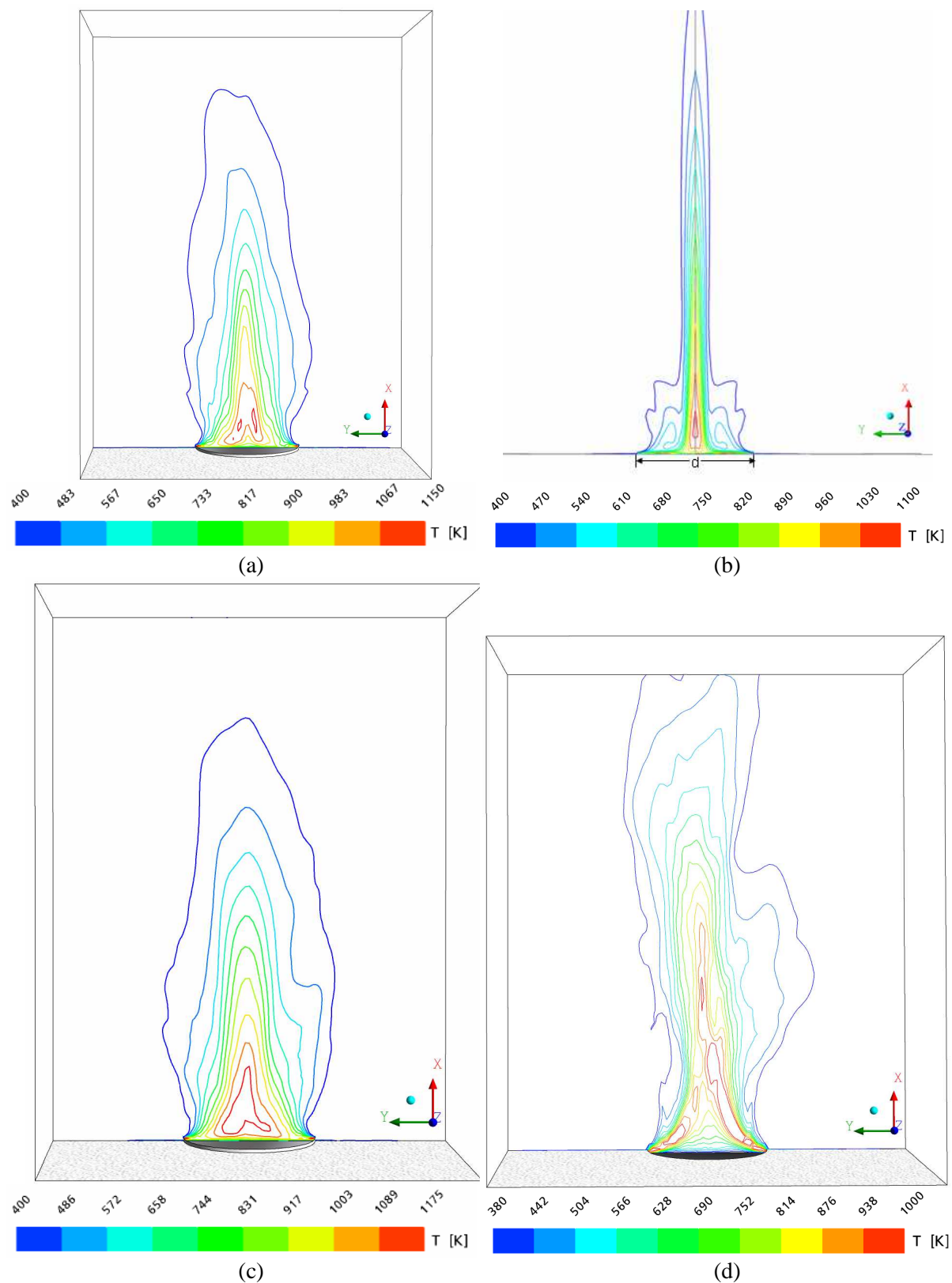
rischen Poolflamme (Abb. 6.25b) an der Rotationsachse  $x$  gespiegelt. Beim Vergleich der Abbildungen der Kerosin-Poolflammen fällt auf, dass die Wahl der Rotationssymmetrie bei  $d = 16$  m einen deutlichen Einfluss auf das mittlere Temperaturfeld hat. Die Maxima der mittleren Temperaturen sind mit  $\bar{T}_{\max}(d = 16 \text{ m}) = 1111 \text{ K}$  etwa  $100 - 160 \text{ K}$  niedriger als bei den beiden Kerosinflammen mit Spiegelsymmetrie. Ein wesentlicher Unterschied liegt aber vor allem in den schnell abfallenden Temperaturen mit zunehmendem Abstand von der Flammenachse. Eine exakte Validierung ist in diesem Fall aufgrund fehlender experimenteller Daten leider nicht möglich. Aus dem Vergleich mit ähnlichen Flammen wie z.B. den zeitlich gemittelten Isothermen einer Heptan-Poolflamme mit  $d = 6 \text{ m}$  nach Koseki [51] ( $\rightarrow$  Abb. 2.11) und den Langzeitäquidensitenstrukturen einer LNG-Tankflamme mit  $d = 4 \text{ m}$  nach Schönbucher [2,137,138], die näherungsweise die Wärmeverteilung der dortigen Flamme wiedergeben, ergibt sich aber, dass der weniger steile Abfall in den beiden spiegelsymmetrischen Simulationen die experimentellen Ergebnisse sehr gut wiedergibt. Es zeigt sich sowohl in den Simulationen wie auch in den Experimenten, dass die Maxima der gemittelten Temperaturen entlang einer gekrümmten Kurve liegen, die vom Poolrand ausgehend zur Flammenachse führt. Da die Flammen in der Simulation im Gegensatz zu den meisten Experimenten frei von externen Strömungseinflüssen wie z.B. Wind sind, ist im zeitlichen Mittel eine Rotationssymmetrie um die  $x$ -Achse zu erwarten. Diese Symmetrie ist in den Abbildungen recht gut gegeben. Die geringen Abweichungen von der Symmetrie in den Abb. 6.25c-d lassen sich auf das Zeitintervall für die Mittelung zurückführen. Mit einem zunehmenden Mittelungsintervall ist eine stetige Zunahme der Symmetrie des mittleren Temperaturfeldes zu erwarten.

### 6.5.2 Temperaturprofil

Der bereits anhand der Geschwindigkeitsfelder diskutierte Unterschied zwischen der Temperaturverteilung in den Flammen mit der rotationssymmetrischen und den spiegelsymmetrischen Randbedingungen wird in den Profilen der mittleren Temperatur besonders deutlich. Die Profile der beiden Kerosin-Poolflammen, die unter Zuhilfenahme einer Spiegelebene berechnet wurden, unterscheiden sich in den dimensionslosen Höhen  $x/d = 0.5$  und  $x/d = 1$  nur wenig. Das Profil der Poolflamme mit der rotationssymmetrischen Randbedingung weicht hingegen deutlich von denen der Anderen ab. Die beiden spiegelsymmetrischen Kerosinflammen erreichen in der relativen Höhe  $x/d = 1 \text{ m}$  mit  $\bar{T}_{\max} \approx 1000 \text{ K}$  sogar fast die gleichen Maxima. In einer relativen Höhe  $x/d = 0.5$  liegt das Maximum der mittleren Temperatur in der Flamme mit dem größeren Poldurchmesser mit  $\bar{T}_{\max}(d = 20 \text{ m}) \approx 1200 \text{ K}$  allerdings etwa um  $100 \text{ K}$  höher als bei der kleineren Poolflamme mit  $d = 10 \text{ m}$ .

Die geringen Unregelmäßigkeiten in der Steigung der Kurven sind auf den Mittelungszeitraum zurückzuführen. Die Auswölbung des Profils der großen Flamme bei  $y/d = -0.5$  wird beispielsweise von einem überdurchschnittlich heißen und leicht zur Seite steigenden Wirbel verursacht. Bei einem deutlich längeren Zeitraum würde der Einfluss einzelner Wirbel stärker herausgemittelt. Aufgrund der noch sehr langen Rechenzeiten ist eine erhebliche Weiterführung der Berechnungen aber nicht praktikabel.

Die Profile der rotationssymmetrischen Kerosin-Poolflamme unterscheiden sich deutlich von denen der anderen beiden Flammen. Das Maximum der mittleren Temperatur ist mit

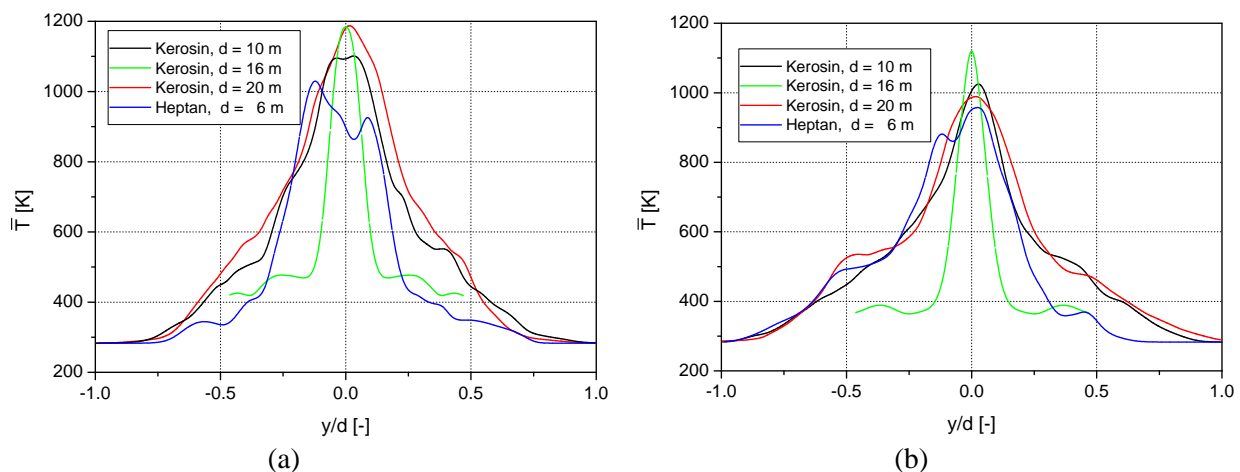


**Abb. 6.25.** Zeitlich gemittelte Temperaturfelder der verschiedenen Flammen in der  $xy$ -Ebene: (a) Kerosin,  $d = 10$  m; (b) Kerosin,  $d = 16$  m (Grafik an der Rotationsachse  $x$  gespiegelt); (c) Kerosin,  $d = 20$  m; (d) Heptan,  $d = 6$  m.

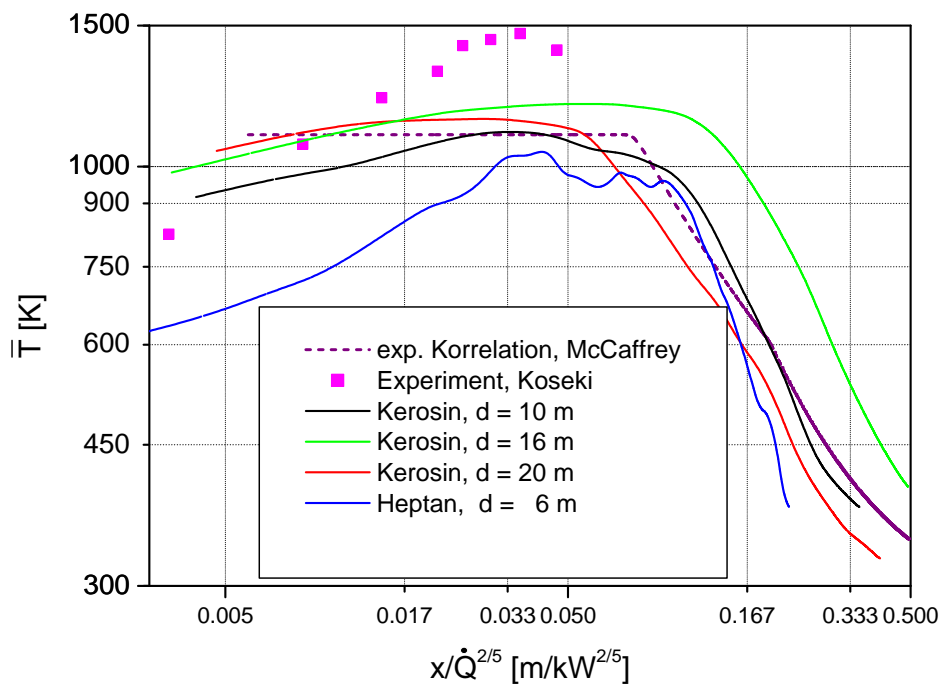
$\bar{T}_{\max}$  ( $d = 16$  m)  $\approx 1000$  K nochmals um 100 K niedriger als das der kleineren Poolflamme mit  $d = 10$  m. Der wesentliche Unterschied ist allerdings der schnelle Abfall vom Maximum bei  $y/d = 0$  auf ca.  $\bar{T}$  ( $d = 16$  m)  $\approx 400$  K bei  $y/d = 0.17$ .

Die Profile der als spiegelsymmetrische angenommenen Heptan-Poolflamme ähneln sehr deutlich denen der beiden ebenfalls spiegelsymmetrischen simulierten Kerosin-Poolflammen. Sie scheinen jedoch etwas weniger symmetrisch, was mit der Beobachtung des wechselnden Neigens in verschiedene Richtungen im Einklang steht. Zum Erreichen eines vollständig symmetrischen Profils wäre offenbar die Berechnung eines deutlich längeren Zeitraums notwendig. Das Profil der mittleren Temperatur der Heptanpoolflamme in der relativen Höhe  $x/d = 0.5$  erreicht ein um etwa 80 K niedrigeres Maximum als das der kleinsten berechneten Kerosinflamme. Das Maximum liegt allerdings nicht unmittelbar an der Flammenachse. Dies kann an der zu kurzen Mittelungszeit liegen oder auch an der Tatsache, dass in niedrigen Höhen die maximale Temperatur nicht immer an der Flammenachse zu finden ist. Besonders in kleineren Tank- und Poolflammen lässt sich dies beobachten. In der relativen Höhe  $x/d = 1.0$  ist der Unterschied der mittleren Temperaturen geringer, hier liegt das Maximum der Heptanflamme nur um 30 K unter dem der Kerosinflamme mit  $d = 20$  m.

Zum Vergleich der mittleren Temperaturen verschiedener Flammen entlang der Mittelachse wird oftmals die Korrelation von McCaffrey ( $\rightarrow$  Kap. 2.4) herangezogen. Die Auftragung der simulierten mittleren Flammentemperaturen auf der Flammenachse gegen die dimensionslose Höhe  $x/\dot{Q}^{2/5}$  gibt das von McCaffrey beschriebene Profil insbesondere für die Kerosinflammen recht gut wieder ( $\rightarrow$  Abb. 6.27). Abweichungen können dadurch zustande kommen, dass die Korrelation auf Experimenten an Brennerflammen mit einem sehr geringen Anfangsimpuls und einer quadratischen Grundfläche von nur 0.3 m Kantenlänge basiert. So beobachtet McCaffrey bei verschiedenen Wärmefreisetzungsraten  $\dot{Q}$  im zeitlichen Mittel stets die gleiche maximale Temperatur von  $\bar{T}_{\max} = 1073$  K. Diesen Wert definiert er als Standardtemperatur bis zu einer relativen Höhe von  $x/\dot{Q}^{2/5} = 0.08$  m/kW $^{2/5}$ . Sowohl die Messungen von Kosaki und auch McCaffrey selbst ( $\rightarrow$  Abb. 2.10), als auch die Simulationen zeigen teilweise sehr deutliche Abweichungen von der Korrelation für sehr niedrige relative Höhen  $x/\dot{Q}^{2/5} < 0.02$  m/kW $^{2/5}$ . Für den Vergleich in dieser Höhe sollte die Korrelation nicht herangezogen werden. In den Simulationen der Kerosinflammen ergibt sich weiterhin eine Abhän-



**Abb. 6.26.** Profile der mittleren Temperatur verschiedener Flammen in deren  $xy$ -Ebene: (a)  $x/d = 0.5$ , (b)  $x/d = 1.0$ .



**Abb. 6.27.** Profile der mittleren Temperatur entlang der Flammenachse: Ergebnisse der verschiedenen Simulationen, Korrelation nach McCaffrey [49] sowie Messergebnisse von Koseki [51].

gigkeit des Maximums der mittleren Temperatur von  $d$  mit  $\bar{T}_{\max}(d = 10 \text{ m}) = 1176 \text{ K}$ ,  $\bar{T}_{\max}(d = 16 \text{ m}) = 1111 \text{ K}$  und  $\bar{T}_{\max}(d = 20 \text{ m}) = 1277 \text{ K}$  für. Dies ist in Übereinstimmung mit den Experimenten von Koseki [51], in denen die mittleren Temperaturen von Heptan-Poolflammen mit zunehmenden Pooldurchmesser, abgesehen von einer Ausnahme, ebenfalls ansteigen ( $\rightarrow$  Abb. 2.12). Insbesondere die Poolflamme mit  $d = 6 \text{ m}$  erreicht dabei eine wesentlich höhere Maximaltemperatur von  $\bar{T}_{\max} = 1466 \text{ K}$ . Dem steht in der Simulation eine deutlich niedrigere Maximaltemperatur von  $\bar{T}_{\max} = 1046 \text{ K}$  gegenüber.

Kosekis Messungen erfolgten bis zu einer relativen Höhe von  $x/d = 2$  bzw.  $x/\dot{Q}^{2/5} = 0.46 \text{ m/kW}^{2/5}$ , das Profil für größere Höhen liegt nicht vor. Da der letzte Messpunkt eine Absenkung der Achsentemperaturen entsprechend der Korrelation andeutet, erscheint der Vergleich der simulierten Temperaturprofile mit der Korrelation in größeren Höhen durchaus zulässig. Die Simulationen zeigen in diesem Bereich der Übergangszone und der Flammenfahne die gleiche Absenkung der Temperaturen wie die Korrelation. Die Simulationen geben also überwiegend die Messergebnisse für relative Höhen von  $x/\dot{Q}^{2/5} > 0.08 \text{ m/kW}^{2/5}$  recht gut wieder.

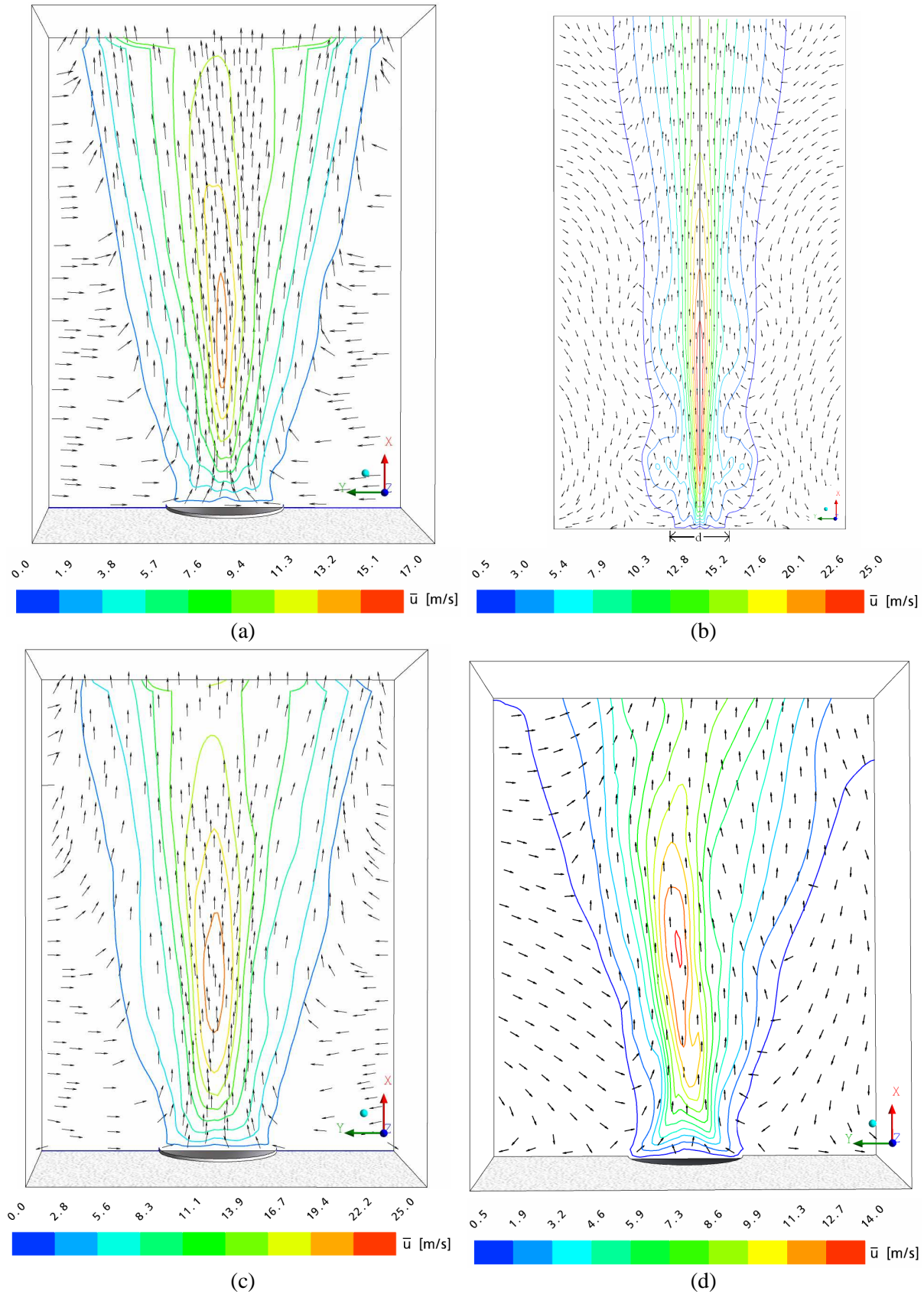
Die deutlichsten Abweichungen von der Korrelation liegen im Profil der mittleren Kerosin-Poolflamme mit  $d = 16 \text{ m}$  in größeren Höhen vor. Zusammen mit den radialen Profilen lässt sich daraus schließen, dass mit zunehmendem Abstand von der Pooloberfläche die Flamme immer unsymmetrischer wird, so dass die Einführung einer Rotationsachse mit zunehmender Höhe zu Ungenauigkeiten in den Simulationsergebnissen führt. Die Erweiterung von der Rotationssymmetrie auf die Spiegelsymmetrie in den beiden anderen Kerosinflammen führt zu deutlich besseren Ergebnissen.

### 6.5.3 Strömungsgeschwindigkeiten

Beim Vergleich der mittleren Strömungsfelder der verschiedenen Poolflammen (→ Abb. 6.28) zeigt sich ebenso wie in den Temperaturfeldern eine Abhängigkeit des Maximums der mittleren Geschwindigkeit vom Pooldurchmesser. Mit zunehmendem Durchmesser nimmt das Maximum der mittleren Strömungsgeschwindigkeit von  $\bar{u}_{\max}$  ( $d = 6$  m)  $\approx 13.5$  m/s für die Heptanflamme über  $\bar{u}_{\max}$  ( $d = 10$  m)  $\approx 17$  m/s auf  $\bar{u}_{\max}$  ( $d = 16$  m,  $d = 20$  m)  $= 25$  m/s für die Kerosinflammen stetig zu. Diese Tendenz wurde auch von Koseki für Heptanpoolflammen gefunden (→ Abb. 2.13).

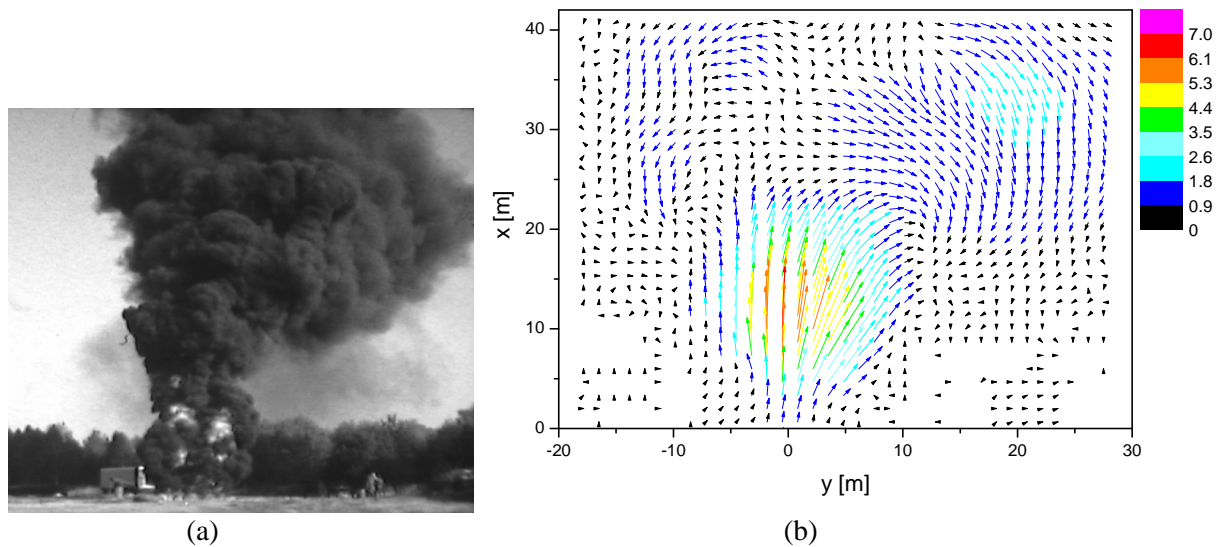
Die mittleren Geschwindigkeitsfelder vor allem der spiegelsymmetrischen Flammen verdeutlichen den Vorgang des Entrainments (→ Kap. 2.2). Das bedeutet, dass im zeitlichen Mittel die heißen Flammengase in der Flamme aufsteigen wodurch wiederum kalte Umgebungsluft von den Seiten angesaugt wird. Dadurch wird die Flamme mit ausreichend Sauerstoff versorgt, um die Reaktionen aufrecht zu erhalten.

Die sehr deutliche Absenkung der mittleren Geschwindigkeit in radialer Richtung in der Kerosinflamme mit der Rotationssymmetrie zeigt, wie schon in den Temperaturfeldern gesehen (→ Kap. 6.5.2), dass die Annahme der Rotationssymmetrie mit zunehmendem Abstand vom Pool zu Ungenauigkeiten führt. Die Simulationen bei Spiegelsymmetrie sagen hingegen für alle Höhen realistische Geschwindigkeitsfelder vorher. Da keine gemessenen Geschwindigkeitsfelder im Flammeninnern vorliegen sind zum Vergleich in Abb. 6.30 die mit der digitalen Bildanalyse bestimmten mittleren Geschwindigkeiten der sichtbaren Rußstrukturen einer Kerosin-Poolflamme mit  $d = 8$  m dargestellt. Bei dieser Methode werden die dreidimensionalen Strukturen an der Flammenoberfläche in die zweidimensionale Bildebene projiziert und dann mittels Kreuzkorrelationen die Verschiebungsvektoren ermittelt [57-59]. Daher lassen sich die so ermittelten Vektoren nicht quantitativ mit dem Geschwindigkeitsfeld einer konkreten Ebene in einer CFD-Simulation vergleichen. Sie dienen in diesem Fall zur qualitativen Abschätzung der berechneten Felder. Der quantitative Vergleich erfolgt im nächsten Kapitel anhand von Profilen. Auch im Vektorfeld aus der Bildanalyse liegen die höchsten Geschwindigkeiten naturgemäß im Bereich der Flamme. Da die Flamme durch Windeinfluss im oberen Bereich auch im zeitlichen Mittel etwas zu höheren y-Koordinaten geneigt ist, treten dort im Mittel etwas höhere Beträge der Geschwindigkeiten auf. Sowohl in diesem Vektorfeld, als auch in den simulierten Geschwindigkeitsfeldern der Heptanflamme und der Kerosinflamme mit  $d = 16$  m, ist die Strömung außerhalb der Flamme im zeitlichen Mittel entgegen der Hauptströmungsrichtung der heißen Flammengase gerichtet. Dies ist dem Einfluss der an der Flammenoberfläche aufsteigenden Wirbel zuzuschreiben, deren Strömung außerhalb der Flamme stromabwärts gerichtet ist. Die momentanen Geschwindigkeitsbeträge können mit mehreren Metern pro Sekunde deutlich ausgeprägt sein (→ Kap. 6.2.2), wodurch die Wirbel auch im zeitlichen Mittel eine abwärts gerichtete Strömung bewirken. Die mittleren abwärts gerichteten Geschwindigkeitsbeträge erreichen allerdings nur kleine Werte von  $\bar{u} < 1$  m/s.



**Abb. 6.28.** Zeitlich gemittelte Strömungsfelder der verschiedenen Flammen in der  $xy$ -Ebene. Die Vektoren sind in der Länge normiert und zeigen nur die Strömungsrichtung an: (a) Kerosin,  $d = 10$  m; (b) Kerosin,  $d = 16$  m (Grafik an der Rotationsachse  $x$  gespiegelt); (c) Kerosin,  $d = 20$  m; (d) Heptan,  $d = 6$  m.

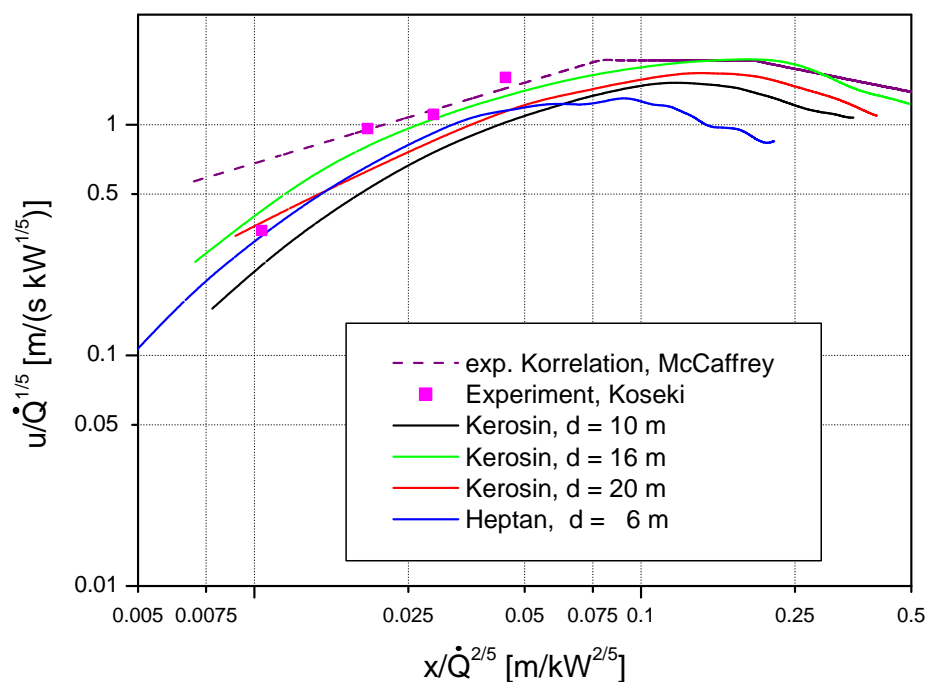




**Abb. 6.30.** Kerosin-Poolflamme mit  $d = 8$  m [57-59]: (a) Fotografische Aufnahme zu einem bestimmten Zeitpunkt; (b) Mit der digitalen Bildanalyse ermittelte, zeitlich gemittelte Geschwindigkeiten der sichtbaren Rußstrukturen.

#### 6.5.4 Geschwindigkeitsprofile

Zur quantitativen Beurteilung der Strömungsgeschwindigkeiten werden die mittleren Geschwindigkeiten an der Flammenachse, wie auch bereits die Temperaturprofile, mit der Korrelation von McCaffrey verglichen. Außerdem liegen für die Heptan-Poolflamme mit  $d = 6$  m Messungen von Koseki vor. Wie bereits bei den Temperaturprofilen zeigt sich auch hier eine Abweichung der Korrelation von den Experimenten und CFD-Simulationen für sehr niedrige



**Abb. 6.29.** Profile der mittleren Geschwindigkeit entlang der Flammenachse: Ergebnisse der verschiedenen Simulationen, Korrelation nach McCaffrey [49] sowie Messergebnisse von Koseki [51].

relative Höhen  $x/\dot{Q}^{2/5} < 0.02 \text{ m/kW}^{2/5}$ . Für darüber liegende Höhen zeigt die Auftragung der normierten Geschwindigkeiten  $u/\dot{Q}^{1/5}$  aus den CFD-Simulationen gegen die dimensionslose Höhe  $x/\dot{Q}^{2/5}$  eine recht gute Übereinstimmung mit der Korrelation. Die Beträge der simulierten Geschwindigkeiten sind jedoch, mit Ausnahme der der Kerosinflamme mit  $d = 16 \text{ m}$ , durchweg niedriger. Die Höhe der Abweichungen ist je nach betrachteter Zone unterschiedlich. Während im Bereich, den McCaffrey als Flammenbereich bezeichnet, die Kerosinflammen mit  $d = 10 \text{ m}$  und  $d = 20 \text{ m}$  die größten Abweichungen aufweisen, verläuft ab dem Bereich, den er als Übergangszone bezeichnet, das Profil der Heptan-Poolflamme deutlich unterhalb der Korrelation.

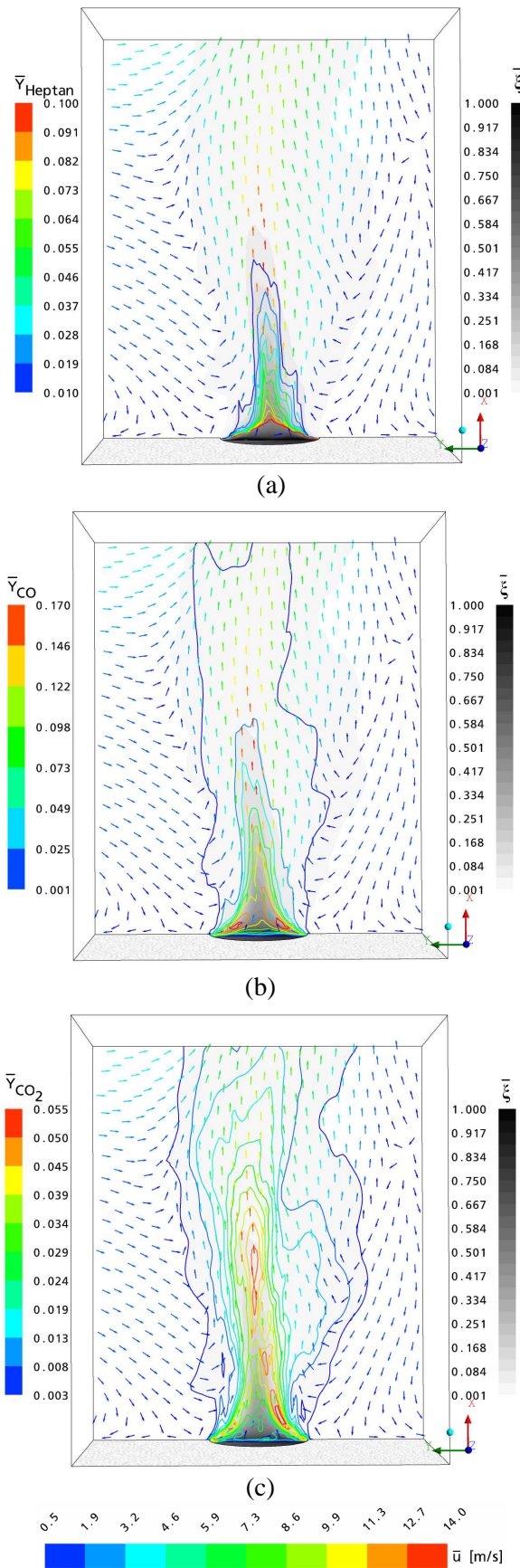
Da insgesamt die mit der CFD berechneten Profile der mittleren Strömungsgeschwindigkeiten an der Flammenachse zu niedrig ausfallen, könnte die Ursache im Turbulenzmodell begründet sein. Möglicherweise führt die dämpfende Wirkung des  $k$ - $\epsilon$ -Modells zur Abschwächung von Geschwindigkeitsspitzen, die sonst zur Anhebung des Mittelwertes beitragen würden. Zukünftige Simulationen mit einem anderen Ansatz zur Turbulenzmodellierung, wie z.B. die Large-Eddy-Simulation, könnten Vergleichswerte liefern, um den Einfluss des Turbulenzmodells besser einschätzen zu können.

### 6.5.5 Speziesmassenanteile

Zur Validierung der mittleren Speziesmassenanteile liegen zum jetzigen Zeitpunkt leider keine empirischen Daten für große Poolflammen vor, daher kann hier nur eine qualitative Beurteilung dieser Größen erfolgen. Dazu sind in Abb. 6.31 stellvertretend für alle simulierten Flammen die mittleren Massenanteile des Brennstoffs, zweier Reaktionsprodukte und das mittlere Strömungsfeld in der  $xy$ -Ebene der Heptan-Poolflamme dargestellt.

Der mittlere Massenanteil des Brennstoffs Heptan nimmt über dem Pool sehr schnell ab, auf der Flammenachse unterschreitet er schon ab einer Höhe von  $x = 1.2 \text{ m}$  den Wert von  $\bar{Y}_{\text{Heptan}} = 0.1$ , in einer Höhe von  $x = 9.5 \text{ m}$  liegt er nur noch bei  $\bar{Y}_{\text{Heptan}} = 0.01$ . Mit zunehmendem radialen Abstand ist die Absenkung des Mittelwertes sogar noch deutlicher. Auch hier spiegelt sich, wie bereits in den vorigen Kapiteln besprochen, das Entrainment wieder. Das Ansaugen der Umgebungsluft führt in Poolnähe im zeitlichen Mittel zu einer Reaktionszone, die unmittelbar vom Poolrand entlang einer gekrümmten Kurve zur Flammenachse führt. In der Reaktionszone erfolgt neben der Heptanabnahme eine Zunahme der Massenanteile von Zwischen- und Endprodukten der Reaktionen wie z.B. Kohlenstoffmonoxid und Kohlenstoffdioxid. Insbesondere beim Vergleich des mittleren Temperaturfeldes ( $\rightarrow$  Abb. 6.25d) mit dem mittleren Massenanteil des Kohlenstoffdioxids lässt sich die Lage der Reaktionszone im zeitlichen Mittel gut deuten. In beiden Feldern liegen die Maxima in den gleichen Regionen, d.h. dass dort die exotherme Reaktion zu Kohlenstoffdioxid stattfindet. Vor allem bei sehr kleinen Massenanteilen der gezeigten Spezies treten noch Abweichungen von der Spiegelsymmetrie auf. Es ist anzunehmen, dass diese bei einem zunehmenden Mittelungsintervall entsprechend geringer werden würden.



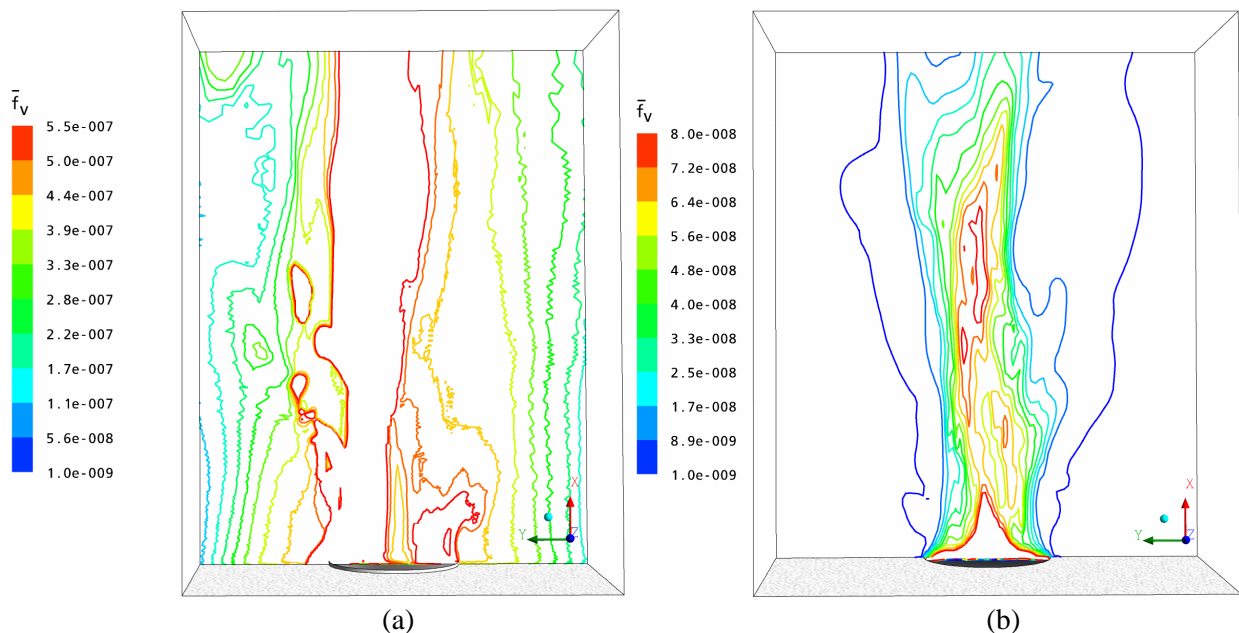


**Abb. 6.31.** Mittleres Strömungsfeld, mittlerer Mischungsbruch sowie die mittleren Massenanteile ausgewählter Spezies in der xy-Ebene der Heptan-Poolflamme mit  $d = 6$  m: (a) Heptan; (b) Kohlenstoffmonoxid ; (c) Kohlenstoffdioxid.

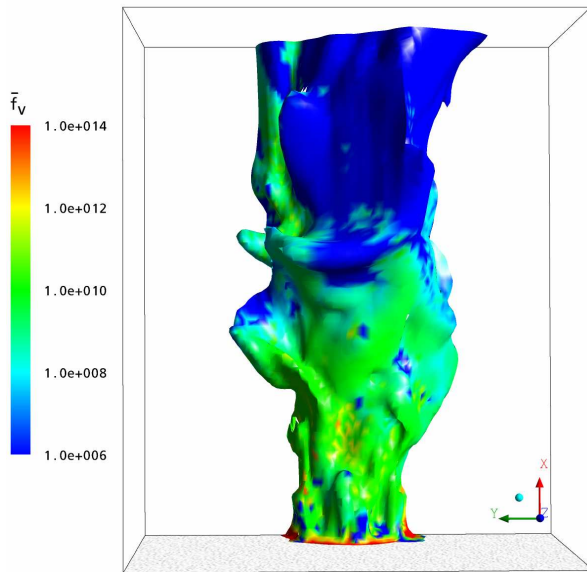
### 6.5.6 Rußvolumenanteile

Zum jetzigen Zeitpunkt können keine empirischen Daten zur Validierung der Rußvolumenanteile in großen Poolflammen herangezogen werden, es liegen lediglich Messungen in kleinen Poolflammen vor. Es erfolgt in diesem Kapitel ein Vergleich der mit den beiden unterschiedlichen Rußmodellen berechneten Ergebnisse. Dazu sind in Abb. 6.32 die mittleren Rußvolumenanteile in der xy-Ebene der Heptan-Poolflamme und, exemplarisch für die drei Kerosin-Flammen, in der kleinsten berechneten Kerosin-Poolflamme mit  $d = 10$  m dargestellt. In der Heptanflamme, in der das Lindstedt-Modell zur Rußberechnung verwendet wird, findet die Rußbildung vor allem in Poolnähe statt. Das führt dort zu örtlichen Maxima von  $\bar{f}_v \approx 7.0 \cdot 10^{-7}$ . In den im zeitlichen Mittel sehr heißen Zonen der Flamme über dem Pool nimmt der mittlere Rußvolumenanteil dann sehr deutlich ab, hier ist offenbar die Rußoxidation der dominierende Term. Die im zeitlichen Mittel aufsteigenden, heißen Flammengase transportieren die Rußpartikel dann in größere Höhen. In radialer Richtung nimmt der Rußvolumenanteil um einige Zehnerpotenzen ab, so dass sich der Flammenbereich deutlich von der Umgebungsluft unterscheiden lässt. In Abb. 6.33 ist zur Verdeutlichung der mittleren Rußkonturen in der Heptan-Poolflamme eine Isofläche mit dem zeitlich gemittelten Rußvolumenanteil  $\bar{f}_v = 3.0 \cdot 10^{-9}$  dargestellt. Die logarithmische Farbskala gibt die mittlere Rußpartikeldichte auf dieser Isofläche an. Ähnlich wie der Rußvolumenanteil nimmt auch die Rußpartikeldichte unmittelbar über dem Pool sehr hohe Werte von  $\bar{N}_s \gg 1 \cdot 10^{14}$  an, nimmt darüber jedoch deutlich auf etwa  $\bar{N}_s = 1 \cdot 10^{10}$  ab. Die Partikeldichte bleibt in dieser Größenordnung bis zu einer relativen Höhe von  $x/d \approx 2$ , erst dann nimmt sie deutlich ab.

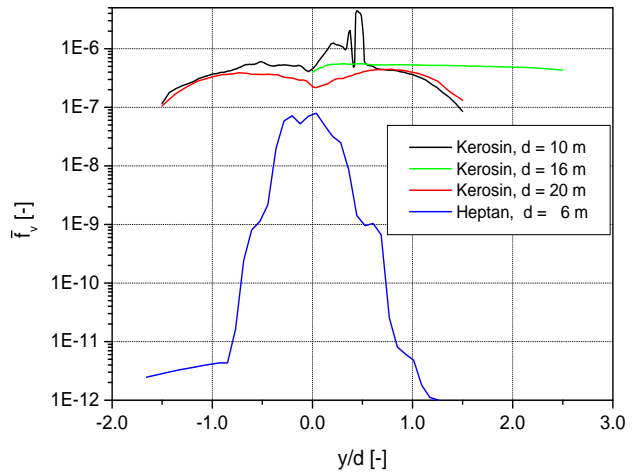
Die mit dem Magnussen-Modell berechnete Rußverteilung in der Kerosinflamme unterscheidet sich deutlich von der Verteilung in der Heptanflamme. Die berechneten Werte innerhalb der Kerosinflamme liegen etwa eine Zehnerpotenz über denen in der Heptanflamme. Es



**Abb. 6.32.** Zeitlich gemittelte Rußvolumenanteile in der xy-Ebene: (a) Kerosin-Poolflamme,  $d = 10$  m; (b) Heptan-Poolflamme,  $d = 6$  m.



**Abb. 6.33.** Isofläche des zeitlich gemittelten Rußvolumenanteils  $\bar{f}_v = 3.0\text{E-}9$ , eingefärbt mit dem zeitlichen Mittelwert der Rußpartikeldichte (logarithmische Skala) in der Heptan-Poolflamme mit  $d = 6\text{ m}$ .



**Abb. 6.34.** Profile der zeitlich gemittelten Rußvolumenanteile der verschiedenen Poolflammen in der relativen Höhe  $x/d = 1.0$  und  $z = 0$ .

stellt sich bei  $y/d = +0.5$ , also über dem linken Poolrand in Abb. 6.32a, ein deutlich höherer, mittlerer Rußvolumenanteil ein als auf der gegenüberliegenden Poolseite. Außerdem liegt nur eine relativ geringe Abnahme des Rußvolumenanteils in radialer Richtung vor. Besonders deutlich wird dies in den Profilen in der relativen Höhe von  $x/d = 1.0$  ( $\rightarrow$  Abb. 6.34). Im Gegensatz zur Heptanflamme liegt das Maximum von  $\bar{f}_v$  in allen drei Kerosinflammen nicht an der Flammenachse, sondern in der Nähe des Poolrandes. Mit zunehmendem, radialem Abstand erfolgt nur eine allmähliche Abnahme, so dass im Gegensatz zur Heptanflamme keine klare Abgrenzung zwischen Flamme und Umgebung anhand des Rußes möglich erscheint. Dies legt die Vermutung nahe, dass bei Verwendung des Magnussen-Modells, das für Flammen mit kleinen Durchmessern entwickelt wurde, die konvektiven Parameter in großen Poolflammen einen zu großen Einfluss gewinnen und somit den Ruß zu stark in alle Raumrichtungen transportieren. Die ungleiche Rußverteilung in der betrachteten Kerosinflamme, in der der Rußvolumenanteil für negative  $y$ -Koordinaten meist deutlich kleiner als für positive  $y$ -Koordinaten ist, scheint außerdem auf eine Anfälligkeit für numerische Instabilitäten bei dieser Art von Problemstellung hinzudeuten. Die Berechnung des Absorptionskoeffizienten in Abhängigkeit vom Rußmassenanteil würde bei Verwendung des Magnussen-Modells aufgrund der relativ gleichmäßigen Rußverteilung über das gesamte Bilanzgebiet zu einem entsprechend gleichmäßigen Koeffizienten führen. Daher wird in den Kerosin-Poolflammen der Absorptionskoeffizient in Abhängigkeit von der Temperatur in Anlehnung an das Strahlungsmodell OSRAMO II definiert ( $\rightarrow$  Kap. 5.4.4.1).

Die in der Literatur angegebenen berechneten Maxima des Rußvolumenanteils für kleine Poolflammen liegen zwischen  $1\text{E-}6 \leq \bar{f}_v \leq 16\text{E-}6$  [67,114,117] und sind somit etwas größer als die hier für die Kerosinflammen berechneten Werte bzw. etwa ein bis zwei Größenord-

nungen größer als die Maxima der Heptan-Poolflamme. Da keine Messungen oder Publikationen detaillierter Profile vorliegen, lässt sich zum jetzigen Zeitpunkt nicht eindeutig beurteilen, ob die Rußvolumenanteile in großen Poolflammen tatsächlich deutlich kleiner sind als in kleinen Poolflammen. Es wäre beispielsweise möglich, dass in Simulationen mit den verschiedenen Oxidationsansätzen von Fenimore und Jones [70] oder Liu [117] kleinere Oxidationsgeschwindigkeiten berechnet werden und dadurch der mittlere Rußvolumenanteil erhöht wird. Ohne Vorlage empirischer Daten können die Vergleichsrechnungen allerdings nur schwer beurteilt werden. Insgesamt erscheint die Verwendung des von Lindstedt publizierten Reaktionsmechanismus in großen Poolflammen sinnvoll, da sie zu sehr plausiblen Ergebnissen führt.

## 6.6 Flammenlängen

Zur Ermittlung der mittleren Flammenlängen kann hier nicht, wie in Experimenten oftmals üblich, die sichtbare Flammenkontur herangezogen werden, da die Strahlungsberechnung ohne Auflösung der einzelnen Wellenlängen erfolgt. Daher wird als Kriterium ein Speziesmassenanteil festgelegt. Im Rahmen dieser Arbeit wird angenommen, dass im zeitlichen Mittel der Brennstoff ab einer bestimmten Höhe verbraucht ist und somit keine Reaktionen mehr stattfinden. In der darüber liegenden Flammenfahne liegen nur noch heiße, inaktive Rauchgase vor. In den Kerosin-Poolflammen, in denen eine Globalreaktion definiert wird, hat es sich als zweckmäßig erwiesen, die Flammelänge gleich der Höhe zu setzen, an dem der Massenanteil des Kerosins an der Flammenachse auf 1% gesunken ist. Die weitere Abnahme des Massenanteils erfolgt dann sehr langsam, so dass ein niedrigerer Grenzwert nicht sinnvoll erscheint. In der Heptan-Poolflamme, in der mit dem Flamelet-Modell zahlreiche Reaktionen und Zwischenprodukte berücksichtigt werden, sinkt der Massenanteil des ursprünglichen Brennstoffs Heptan schon in der relativ niedrigen dimensionslosen Höhe von  $x/d = 1.58$  m auf 1% ab. In dieser Höhe liegen jedoch noch andere Spezies vor, die die Reaktionen Aufrecht erhalten. In dieser Flamme lässt sich das Kohlenstoffmonoxid als Indikator für die Flammenlänge heranziehen, da es wegen seiner relativ hohen Aktivierungsenergie sehr spät zu Kohlenstoffdioxid reagiert. Es wird daher ein Grenzwert von  $\bar{Y}_{CO} = 0.01$  festgelegt. Die aus diesen Definitionen resultierenden Flammenlängen werden in Tab. 6.3 den mit der Heskestad-Korrelation berechneten Werten gegenüber gestellt. Die Simulationen zeigen, dass die relative Flammenlänge mit steigendem Pooldurchmesser abnimmt. Es liegt überwiegend eine gute Übereinstimmung zwischen den Simulation und Korrelation von Heskestad vor. Die einzige

**Tab. 6.3.** Flammenlängen aus der Simulation und der Korrelation nach Heskestad [39].

Brennstoff	d [m]	$\bar{H}_{CFX}/d$ [m]	$\bar{H}_{Heskestad}/d$ [m]	Abweichung [%]
Kerosin	10	1.5	1.59	-5.6
Kerosin	16	2.22	1.35	+64
Kerosin	20	1.37	1.25	+9.6
Heptan	6	2.75	3.15	-12.7

Ausnahme stellt die Kerosin-Poolflamme mit der Rotationssymmetrie dar. Hier zeigt sich offenbar, wie bereits in den vorigen Kapiteln besprochen, dass mit zunehmendem Abstand vom Pool die Annahme der Rotationssymmetrie zu Ungenauigkeiten führt.

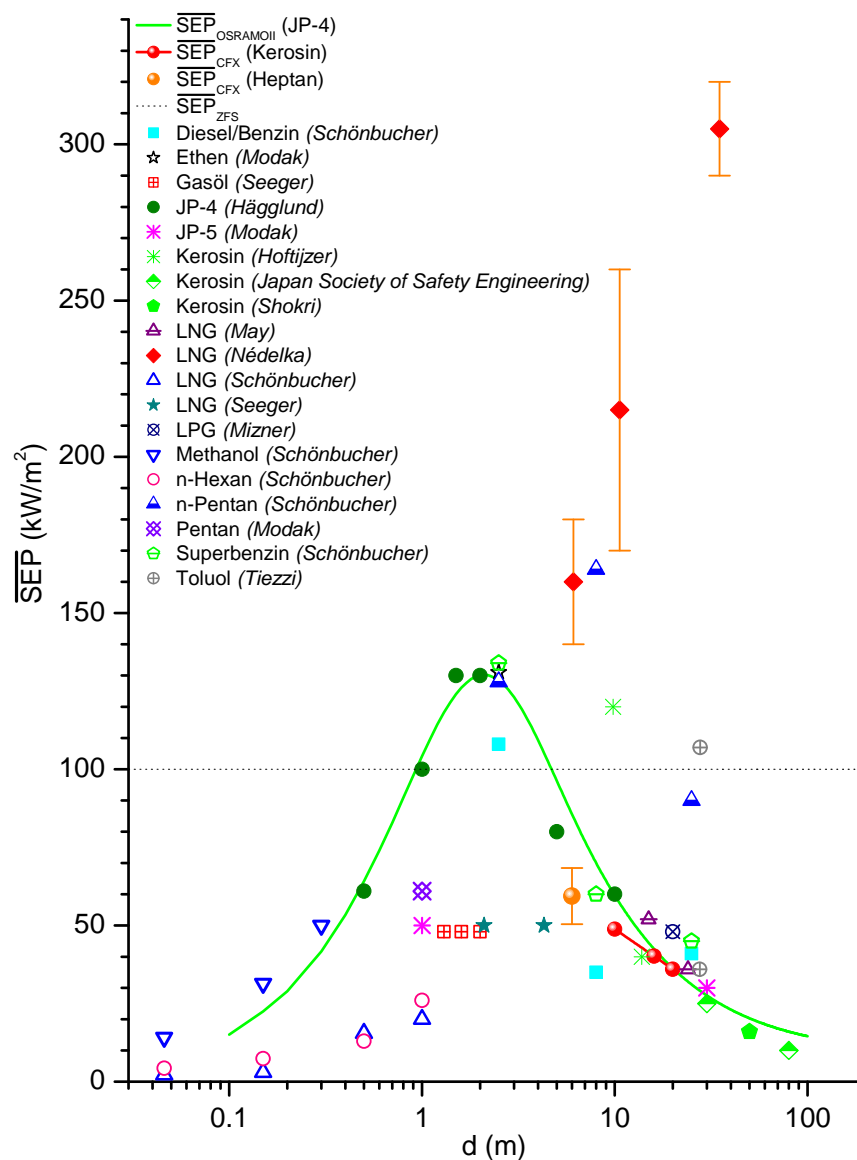
## 6.7 Mittlere spezifische Ausstrahlung

Zur quantitativen Einschätzung der berechneten spezifischen Ausstrahlung der Poolflammen werden die zeitlichen Mittelwerte mit Messungen bzw. dem Strahlungsmodell OSRAMO II verglichen. Die Gegenüberstellung in Tab. 6.4 und Abb. 6.35 zeigt eine gute Übereinstimmung der aus den CFD-Simulationen der Kerosin-Poolflammen erhaltenen Werte mit dem semi-empirischen Strahlungsmodell OSRAMO II für Kerosin bzw. JP4. Während die  $\overline{SEP}$  bei den Pooldurchmessern  $d = 16$  m und  $d = 20$  m nur geringfügig voneinander abweichen tritt lediglich für  $d = 10$  m eine etwas höhere Abweichung auf. Eine Ursache könnte der gewählte Mittelungszeitraum sein, da dieser bei der kleinsten berechneten Kerosinflamme am kürzesten ist. Somit haben hier zeitliche Schwankungen einen größeren Einfluss auf den Mittelwert.

Eine weitere Ursache für die größere Abweichung bei der kleineren Poolflamme kann in der generellen Unsicherheit bei der Bestimmung der Flammenoberfläche liegen. Je nach Kriterium für die Isofläche, die zur Auswertung herangezogen wird, fällt die spezifische Ausstrahlung etwas höher bzw. niedriger aus. In Tab. 6.5 sind mittlere, spezifische Ausstrahlungen der Heptan-Poolflamme aufgeführt, die über verschiedene Isoflächen berechnet worden sind. Die Werte schwanken um den aus ihnen berechneten Mittelwert von  $\overline{SEP} = 59.3 \text{ kW/m}^2$  um ca. 15 %. Die Vorhersage der spezifischen Ausstrahlung einer Poolflamme auf der Basis der CFD-Simulationen ist daher zum jetzigen Zeitpunkt noch mit geringen Unsicherheiten behaftet. Es zeigt sich jedoch sehr deutlich die Pooldurchmesserabhängigkeit der  $\overline{SEP}$  und die für die Kerosin-Poolflammen ermittelten  $\overline{SEP}$ -Werte liegen zum Teil sehr nahe bei den empirischen Werten. Für die Heptan-Poolflamme liegt leider keine Messung zur Validierung vor. Zukünftige Simulationen und Messungen weiterer Flammen können dazu beitragen, ein eindeutiges Kriterium zur Festlegung der Auswertefläche in Flammen mit unterschiedlichen Brennstoffen zu definieren, so dass die Genauigkeit der Vorhersage weiter gesteigert werden kann.

**Tab. 6.4.** Berechnete mittlere spezifische Ausstrahlungen aus den Simulationen und dem Strahlungsmodell OSRAMO II

Brennstoff	d [m]	$\overline{SEP}_{CFX} \text{ [kW/m}^2\text{]}$	$\overline{SEP}_{OSRAMOII} \text{ [kW/m}^2\text{]}$	Abweichung [%]
Kerosin	10	48.8	59.6	18.1
Kerosin	16	40.2	42.5	5.4
Kerosin	20	36.0	36.3	0.8
Heptan	6	56.3	-	



**Abb. 6.35.** Gemessene mittlere spezifische Ausstrahlungen und berechnete Kurven aus dem Zylinderflammenstrahlungsmodell und OSRAMO II [139] sowie aus den CFD-Simulationen, für unterschiedliche Brennstoffe im Pooldurchmesserbereich  $0.5 \text{ m} \leq d \leq 80 \text{ m}$ .

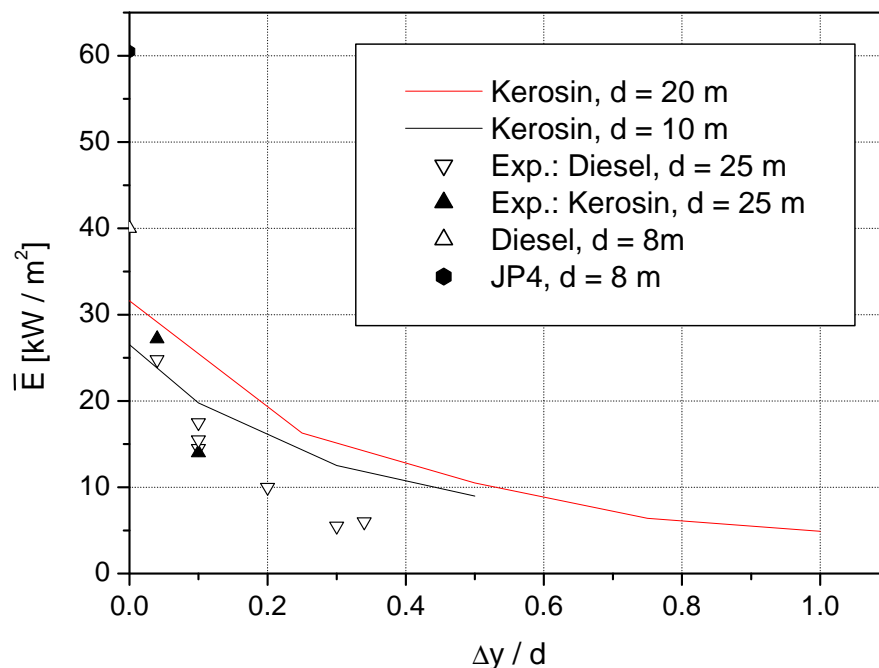
**Tab. 6.5.** Über verschiedene Isoflächen berechnete mittlere spezifische Ausstrahlungen für die simulierte Heptan-Poolflamme.

Kriterium	Einheit	Wert	$\overline{SEP}_{CFX}$ [kW/m²]
Sauerstoffmassenanteil	[-]	0.22	56.3
Mischungsbruch	[-]	0.01	67.4
Kohlenstoffmonoxidmassenanteil	[-]	0.01	68.2
Temperatur	[K]	500	50.5

## 6.8 Mittlere Bestrahlungsstärke

Zur Beurteilung der ermittelten Bestrahlungsstärken sind in Abb. 6.36 die berechneten zeitlichen Mittelwerte für die beiden spiegelsymmetrischen Kerosin-Poolflammen Messwerten verschiedener Poolflammen gegenübergestellt. Da für die berechneten Poolflammen keine Messwerte vorliegen, kann hier nur ein qualitativer Vergleich erfolgen. Es zeigt sich jedoch, dass sowohl in den Simulationen wie auch im Experiment eine deutliche Abnahme der Bestrahlungsstärke bei zunehmendem Abstand vom Poolrand ermittelt wird. Wie im Kap. 6.7 gezeigt, liegen die mittleren spezifischen Ausstrahlungen von Kerosin-Poolflammen bei  $\overline{SEP} (d = 20 \text{ m}) \approx 36 \text{ kW/m}^2$  und  $\overline{SEP} (d = 25 \text{ m}) \approx 31 \text{ kW/m}^2$  recht nah beieinander. Daher ist auch eine entsprechend ähnliche Bestrahlungsstärke bei diesen beiden Flammen zu erwarten, was durch die dargestellten radialen Profile bestätigt wird. Die berechneten Werte liegen etwas über den Messwerten, was mit der höheren spezifischen Ausstrahlung der simulierten Flammen im Einklang steht. Aufgrund der deutlich höheren mittleren spezifischen Ausstrahlung der kleineren Kerosinflamme, die sich aus der Simulation zu  $\overline{SEP} (d = 10 \text{ m}) = 48.8 \text{ kW/m}^2$  ergibt, wäre jedoch eine höhere mittlere Bestrahlungsstärke als bei der größeren Kerosin-Poolflamme zu erwarten. Die Pooldurchmesserabhängigkeit der Bestrahlungsstärke zeigt sich in den Messwerten. Zukünftige Simulationen können zeigen, ob sich die Vorhersage der Bestrahlungsstärke z.B. durch eine deutliche Erhöhung der Strahlwege für die Integration, dann allerdings auf Kosten der Rechenzeit, verbessern lässt.

In Tab. 6.6 sind die kritischen Bestrahlungsstärken technisch wichtiger Objekte aufgeführt. Anhand der Abnahme der berechneten Bestrahlungsstärken mit zunehmendem Abstand von der Poolflamme ließe sich aus den Simulationen ein entsprechender Sicherheitsabstand für die zu schützenden Objekte bestimmen, vorausgesetzt dass die Absolutwerte im relativen Ab-



**Abb. 6.36** Vergleich der berechneten mittleren Bestrahlungsstärken zweier Kerosin-Poolflammen mit Messwerten.

**Tab. 6.6.** Kritische Bestrahlungsstärken  $\bar{E}_{cr}$  technisch wichtiger Objekte [130,131].

	Kritische Bestrahlungsstärke $\bar{E}_{cr}$ [kW/m <sup>2</sup> ]
Empfindliche Gebäude (z.B. Krankenhäuser, Altenheime, Wohnhäuser, Schulen)	1 <sup>1</sup> - 2
öffentliche Straßen	4.5 <sup>1</sup>
Fabrikgebäude (z.B. Kontrollräume, Werkstät- ten)	8, 12.6 <sup>1</sup>
Lagertanks	10, 37.8
spontane Entzündung von Holz	16 bis 25
Konstruktionen, ortsfeste Bauteile	18.9

<sup>1</sup> GER, NL, UK

stand  $\Delta y/d = 0$  richtig sind und die Pooldurchmesserabhängigkeit widerspiegeln. Da jedoch bereits die spezifische Ausstrahlung in Abhängigkeit vom Pooldurchmesser vorhersagbar ist, ist anzunehmen, dass in zukünftigen Simulationen auch eine pooldurchmesserabhängige Berechnung der Bestrahlungsstärke erfolgreich durchgeführt werden kann.

Der Vergleich von Abb. 6.36 mit Tab. 6.6 zeigt, dass aus den Simulationen für die meisten technischen Schutzobjekte Sicherheitsabstände aus den Simulationen vorhergesagt werden können. Im Fall der Kerosin-Poolflamme mit  $d = 20$  m liegt die niedrigste berechnete Bestrahlungsstärke bei  $\bar{E} = 4.9$  kW/m<sup>2</sup> in einem relativen Abstand von  $\Delta y/d = 1$ . Nur für öffentliche Straßen und besonders empfindliche Gebäude wie z.B. Krankenhäuser sind niedrigere kritische Bestrahlungsstärken festgelegt. Abb. 6.36 ist zu entnehmen, dass mit zunehmendem Abstand zur Flamme die negative Steigung der Kurve stetig abnimmt. Daher wird der äußerst niedrige Grenzwert für die empfindlichen Gebäude erst in sehr großen Abständen erreicht. Eine Ausdehnung des Berechnungsgitters auf diese Dimensionen würde entweder mit einem immensen Rechenaufwand erreicht, oder könnte bei einer Vergrößerung des Rechengitters in größeren Abständen zu Ungenauigkeiten führen. Eine Ausdehnung des Rechengitters zur Beschreibung der etwas weniger empfindlichen Straßen wäre jedoch zweifelsfrei möglich, so dass eine Vielfalt von technisch wichtigen Objekten bzw. auch Materialien mit den Simulationen abgedeckt werden kann.



## 7 Schlussfolgerungen und Ausblick

Die durchgeführten CFD-Simulationen zeigen, dass Eigenschaften großer Poolflammen wie z.B. die Flammentemperaturen, Flammenlängen, das Strömungsfeld und die sicherheitstechnisch besonders relevante spezifische Ausstrahlung (SEP) mit hinreichender Genauigkeit vorhersagbar sind. Die Simulationen geben außerdem die Dynamik der Poolflammen wieder, d.h. die Abhängigkeit wichtiger Größen von der Zeit. Dabei müssen allerdings bei der Wahl der Randbedingungen sowie der Submodelle die besonderen Eigenschaften großer Poolflammen berücksichtigt werden. So besitzen große Poolflammen stets eine ausgeprägte, anisotrope Turbulenz und die Rußvolumenanteile unterscheiden sich in der Regel deutlich von denen kleiner Flammen.

Es hat sich gezeigt, dass die Rußbildung in großen Poolflammen mit dem Magnussen-Modell nicht wiedergegeben werden kann. Es werden nicht nur innerhalb sondern auch weit außerhalb der Flamme hohe Rußvolumenanteile berechnet. Mit dem aufwändigeren Lindstedt-Rußmodell lassen sich jedoch in der simulierten großen Heptan-Poolflamme Rußvolumenanteile berechnen, die mit experimentellen Beobachtungen übereinstimmen. In zukünftigen Simulationen von Kerosin-Poolflammen, in denen die Massenanteile des angenommenen Keimbildners Acetylen möglicherweise auch mit einem Flamelet-Verbrennungsmodell berechnet werden können, ist bei Verwendung des Lindstedt-Rußmodells eine ebenso realistische Rußverteilung zu erwarten.

Die Verwendung des Flamelet-Verbrennungsmodells in der Heptan-Poolflamme führt nicht zur besseren Vorhersage der anderen Flammeneigenschaften. Es ist zu erwarten, dass bei Verwendung des Flamelet-Modells bei einer feineren Auflösung der turbulenten Skalen unter Verwendung genauerer Turbulenzmodelle wie z.B. der Large-Eddy-Simulation bessere Vorhersagen erzielt werden.

Die CFD-Simulationen der Kerosin-Poolflammen zeigen generell, in Übereinstimmung mit Experimenten, eine deutliche Abhängigkeit verschiedener Flammeneigenschaften, wie z.B. der Flammenlänge und insbesondere der spezifischen Ausstrahlung (SEP), vom Pooldurchmesser. Die Pooldurchmesserabhängigkeit  $f(d)$  bleibt im Gegensatz dazu beispielsweise bei den konservativen, semi-empirischen Zylinderflammenstrahlungsmodellen unberücksichtigt. Nur bei Kenntnis von  $f(d)$  können jedoch z.B. belastbare Sicherheitsabstände festgelegt werden. Zukünftige Simulationen sollten zeigen, ob diese Durchmesserabhängigkeit auch bei Poolflammen anderer Brennstoffe vorliegt.

Im Unterschied zur spezifischen Ausstrahlung  $SEP(d)$  wird die Durchmesserabhängigkeit der Bestrahlungsstärke  $E(d, \Delta y/d=0)$  durch die CFD-Simulationen unterschätzt.

Zur Verminderung des Messdatenmangels sollten weitere Messungen insbesondere an großen Poolflammen erfolgen. Für eine ausführliche Validierung der CFD-Simulationen sind die

Ermittlung sämtlicher Messunsicherheiten sowie Wiederholungsmessungen zur Berechnung von Standardabweichungen notwendig.

Die vorliegenden CFD-Simulationen von Poolflammen mit großen Pooldurchmessern haben gezeigt, dass geeignete Schutzvorrichtungen sowie angemessene Abstände bzw. Abstandsbereiche zu Schutzobjekten und Personen auf der Grundlage von Rechnungen verlässlich geplant werden können.

## Literaturverzeichnis

- [1] Planas-Chuchi, E., Montiel, H., Casal, J., *Transaction of the Institute of Chemical Engineers* 75, Part B (1997), 3-8
- [2] Schönbucher, A., Brötz, W., Balluff, C., Göck, D., Schieß, N., *Chem.-Ing.-Tech.* 57 (1985), 823-834; Schönbucher, A., *Quellterme*, Institut für Technische Chemie I, Universität Duisburg-Essen, Interner Bericht
- [3] Lees, F.P., *Loss Prevention in the Process Industries*, 2<sup>nd</sup> ed., 3, Butterworth-Heinemann, London, 1996
- [4] Winder, Ch., Totszser, A., Navratil, J., Tandon, R., *Journal of hazardous materials* 31 (1992), 119-134
- [5] Persson, H., Lönnermark, A., *SP Fire Report 2004:14*, SP Swedish National Testing and Research Institute, 2004
- [6] Mudan, K.S., Croce, P.A., in *SFPE I Handbook of Fire Protection Engineering*, 4<sup>th</sup> ed., National Fire Protection Association, Quincy, Ma 02269, 1993
- [7] Göck, D., Fiala, R., Zhang, X., Schönbucher, A., *TÜ* 33, 4 (1992), 137-140 und 6, 219-233
- [8] Peters, N., Rogg, B., *Reduced Kinetic Mechanisms for Application in Combustion Systems*, Springer, Berlin Heidelberg, 1993
- [9] Westbrook, Ch.K., Dryer, F.L., *Comb. Sci. and Technol.* 27 (1981), 31-43
- [10] Sinai, Y.L., Owens, M.P., *Fire Safety J.* 24 (1995), 1-34
- [11] Sinai, Y.L., *Fire Safety J.* 35 (2000), 51-61
- [12] Cetegen, B.M., *Phys. Fluids* 9, 12 (1997), 3742-3753
- [13] Cetegen, B.M., Kasper, K.D., *Phys. Fluids* 8, 11 (1996), 2974-2984
- [14] Ferziger, J.H., Perić, M., *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 2nd Edit., Springer, Berlin Heidelberg, 1997
- [15] Ghoniem, A.F., Lakkis, I., Soteriou, M., 26<sup>th</sup> *Symp. (Int.) Comb.* (1996), The Combustion Institute, Pittsburgh, 1531-1539
- [16] Staus, St.; Schönbucher, A., in *Scientific Computing in Chemical Engineering II* (Keil, F., Mackens, W., Voss, H., Werther, J. (Eds.)), 417-424, Springer Berlin, 1999
- [17] Vela, I.; Kuhr, C.; Schönbucher, A.: *Proc. 11th Int. Symp. On Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries* (2004), Prag, Tschechische Republik
- [18] Spiegel Online, *Fotostrecke* (2005), Online im Internet: <http://www.spiegel.de/fotostrecke/0,5538,11814,00.html>, 2006

- [19] Spiegel Online, *Großfeuer in London: Feuerwehr besiegt Flammenmeer* (2005), Online im Internet: <http://www.spiegel.de/panorama/0,1518,390259,00.html>, 2006
- [20] Spiegel Online, *Britisches Flammenmeer: Total weist Spekulationen über Leck zurück* (2005), Online im Internet: <http://www.spiegel.de/panorama/0,1518,389930,00.html>, 2006
- [21] AcuSafe, Internet Resource for Safety and Risk Management Information, *Thai Oil Refinery Story Summary* (2002), Online im Internet: <http://www.acusafe.com/Incidents/ThaiRefinery1999/Thai-Oil-Refinery-Summary.html>, 2005
- [22] Arnold, B., Banhardt, V., Bieller, V., Kasper, H., Kaufmann, M., Lucas, R., Schieß, N., Schönbucher, A., *21<sup>st</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1988), The Combustion Institute, Pittsburgh, 83-92
- [23] Hamins, A., Yang, J.C., Kashiwagi I., *24<sup>th</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1992), The Combustion Institute, Pittsburgh, 1695-1702
- [24] Balluff, C., *VIS-Ballenstrukturen und Oszillationen in Großflammen*, Dissertation, Universität Stuttgart, 1989
- [25] Cetegen, B.M., Ahmed, T.A., *Comb. Flame* 93 (1993), 157-184
- [26] Blinov, V.I., Khudiakov, G.N., *Academii Nank* (1957), SSSR Doklady , 1094-1098
- [27] Hottel, H.C., *F. Res. Abs. and Rev.* 1 (1959), 41-44
- [28] Burgess, D.S., Strasser, A., Grumer, J., *Fire Res. Abs. and Rev.* 3 (1961), 177-192
- [29] Grumer, J., Strasser, A., Kubala, T.A., Burgess, D.S., *Fire Res. Abs. and Rev.* 3 (1961), 159
- [30] Engelhard, W.F.J.M., in *Methods for the Calculation of Physical Effects – The Yellow Book* (van den Bosch, C.J.H., Weterings, R.A.P.M. (Eds.)), 3<sup>rd</sup> Ed., Part 2, 6.1-6.130, The Committee for the Prevention of Disasters, TNO, The Hague, The Netherlands, 1997
- [31] Raj, P.K., *J. Haz. Mat.* 5 (1981), 111-130
- [32] Raj, P.K., Kalelkar, A.S., *Assessment Models in Support of the Hazard Assessment Handbook* (CG-446-3), Technical Report prepared for the U.S. Coast Guard, NTIS publication #AD776617, 1974
- [33] Sunderland, P.B., Mendelson, B.J., Yuan, Z.-G., Urban, D.L., *Comb. Flame* 116 (1999), 376-386
- [34] Brötz, W., Schönbucher, A., *Chem.-Ing.-Tech.* 50, 8 (1978), 573-585
- [35] Kung, H.C., Stavrianidis, P., *19<sup>th</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1982), The Combustion Institute, Pittsburgh, 905-912
- [36] M. Munoz, Arnaldos, J., Casal, J., Planas, E., *Comb. Flame* 139 (2004), 263-277
- [37] Thomas, P.H., *9<sup>th</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1963), The Combustion Institute, Pittsburgh, 844-859
- [38] Moorhouse, J., *I. Chem. Sym.* 71 (1982), 165-179
- [39] Heskestad, G., *Fire Safety J.* 5 (1983), 103-108
- [40] Mudan, K., *Prog. Energy Combust. Sci.* 10 (1984), 59-80
- [41] Welker, J.R., Sliepcevich, C.M., *Wind interaction Effects on Free Burning Fires*, Tech. Report #1441-3 to Office of Civil Defense of U.S. Bureau of Standards, 1967
- [42] Feldversuche der Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), s. Kap. 3

- 
- [43] American Gas Association, *LNG Safety Research Programm*, Report IS 3-1, 1974
- [44] Planas-Cuchi, E., Casal, J., *J. Hazard. Mat.* 62 (1998), 231-241
- [45] Bainbridge, B.L., Keltner, N.R., *J. Hazar. Mater.* 20 (1988), 21-40
- [46] Gregory, J.J., Keltner, N.R., Mata, R.J., *J. Heat Transfer-Transactions of the ASME* 111 (1989), 446-454
- [47] *VDI-Wärmeatlas*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 1997
- [48] Planas-Cuchi, E., Chatris, J.M., Lopez, C., Arnaldos, J., *Fire Technol.* 39 (2003), 261-273
- [49] McCaffrey, B.J., Purely buoyant diffusion flames: Some experimental results, Report NBSIR 79-1910, Center for Fire Research, 1979
- [50] Baum, H.R., McGrattan, K.B., Rehm, R.G., *Proc. of the 5<sup>th</sup> (Int.) Symp. on Fire Safety Science* (1997), 511-522,
- [51] Koseki, H., Yumoto, T., *Fire Technol.* 24 (1988), 33-47
- [52] Planas-Cuchi, E., Chatris, J.M., Arnaldos, J., Casal, J., *European Safety & Reliability International Conference ESREL 2001*, Torino, Italy, 16.-20. September, 2001
- [53] Weckmann, E.J., Strong, A.B., *Comb. Flame* 105 (1996), 245-266
- [54] Cetegen, B.M., *Combust. Sci. Tech.* 123 (1997), 377-387
- [55] Venkatesh, S., Ito, A., Saito, K., Wichman, I.S., *26<sup>th</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1996), The Combustion Institute, Pittsburgh, 1437 -1443
- [56] Xin, Y., Gore, J.P., McGrattan, K.B., Rehm, R.G., Baum, H.R., *Comb. Flame* 141 (2005), 329-335
- [57] Kuhr, C., Opitz, D. Müller, R., Schönbucher, A., *Proc. 10th Int. Symp. On Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries* (2001), June 19-21, Stockholm, Sweden, 1179-1188
- [58] Kuhr, C., Opitz, D., Müller, R, Schönbucher, A., *5. Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit* (2000), Köthen, GVC.VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, 311-318
- [59] Kuhr, C., *Transiente Felder der Strömungsgeschwindigkeit, Vortizität und Zirkulation in großen JP4-Poolflammen*, Diplomarbeit, Universität Duisburg, 2000
- [60] Takahashi, N., Suzuki, M., Dobashi, R., Hirano, T., *Fire Safety J.* 33 (1999), 1-10
- [61] Frenklach, M., Clary, D.W., Gardiner, W.C., Stein, S.E., *21<sup>st</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1986), The Combustion Institute, Pittsburgh, 632-647
- [62] Bockhorn, H., Schäfer, T., in *Soot Formation in Combustion* (Bockhorn, H. (Ed.)), 253-274, Springer Berlin, 1994
- [63] Dobbins, R., Fletcher, R.A., Chang, H.C., *Comb. Flame* 115 (1998), 285-298
- [64] Bockhorn, H., in *Soot Formation in Combustion* (Bockhorn, H. (Ed.)), 3-7, Springer Berlin, 1994
- [65] Vandsburger, U., Kennedy, I., Glassman, I., *Combust. Sci. Technol.* 39 (1984), 263-285
- [66] Levy, A., *19<sup>th</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1982), The Combustion Institute, Pittsburgh, 1223-1242

- [67] Staus, S., *Numerische Simulationmethode zur Berechnung der Dynamik auftriebsbestimmter, rußender, nicht-vorgemischter Kohlenwasserstoffflammen*, Dissertation, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg, 1999
- [68] Lee, K.B., Thring, M.W., Beer, J.M., *Comb. Flame* 6 (1962), 137-145
- [69] Bradley, D., Dixon-Lewis, G., Habik, S.E.D., Mushi, E.M.J., *20<sup>th</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1984), The Combustion Institute, Pittsburgh, 931-940
- [70] Fenimore, C.P., Jones, G.W., *J. Phys. Chem.* 71 (1967), 593-597
- [71] Dobbins, R., in *Soot Formation in Combustion* (Bockhorn, H. (Ed.)), 290-301, Springer Berlin, 1994
- [72] Seeger, P.G., *Gas-Wasserfach Gas-Erdgas* 120,1 (1979), 25-31
- [73] McGrattan, K.B., Baum, H.R., Hamins, A., *Thermal Radiation from Large Pool Fires*, Report NISTIR 6546, Fire Safety Engineering Division Building and Fire research Laboratory, 2000
- [74] Schönbacher, A., Kuhr, C., Vela, I., Validation of the Semi-Empirical Radiation Model OSRAMO II for Large Pool Fires, Workshop on Heat Transfer in Pool Fires, Livermore, USA, 2005
- [75] Koch, St., Staus, St., Schönbacher, A., Zum Scale-up der Wärmestrahlung störfallbedingter Feuer unterschiedlicher Brennstoffe, in *DECHEMA-Jahrestagungen '95*, Band III, 193-194, 1995
- [76] Göck, D., Fila, R., Schönbacher, A., *Proc. 7th Int. Symp. On Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries* (1992), May 4-8, Taormina, Italien, 68-1 – 68-16
- [77] Fiala, R., Göck, D., Zhang, X., Schönbacher, A., *Chem.-Ing.-Tech.* 63 (1991), 760-761, vollständiges Manuskript als MS 1966/91, 1-78
- [78] Shokri, M., Beyler, C.L., *J. of Fire Prot. Engr.* 1,4 (1989), 141-150
- [79] Siegel, R., Howell, J.R., *Thermal Radiation Heat Transfer*, McGraw-Hill, New York, 1972
- [80] Hägglund, B., Persson, L.E., *FOA Rapport C20126-D6 (A3)*, 1976
- [81] Burgess, D., Hertzberg, M., *Heat Transfer in Flames*, (Afgan, N., Beer, J. (Eds.)), John Wiley, New York, 1974
- [82] Paul, K.-D., Schönbacher, A., in: *Praxis der Sicherheitstechnik* 7, 175, DECHEMA, Frankfurt, 2006
- [83] Schönbacher, A., Modelle der thermischen Strahlung großer Feuer – Bedeutung für Industriestandorte, Process NET, Jahrestagung, Aachen, 2007
- [84] Moorhouse, J., Pritchard, M., *I. Chem. Sym.* 71 (1982), 123-125
- [85] Schönbacher, A., *Thermische Verfahrenstechnik*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2002
- [86] Göck, D., *Experimentell fundierte Ballenstrahlungsmodelle zur Bestimmung von Sicherheitsabständen bei großen Poolflammen flüssiger Kohlenwasserstoffe*, Dissertation, Universität Stuttgart, 1988
- [87] Kolmogorov, A.N., *J. Fluid Mech.* 13 (1962), 82-85
- [88] Griebel, M., Dornseifer, T., Neunhoeffer, T., *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik*, Vieweg, Braunschweig, 1995

- 
- [89] Oran, E.S., Boris, J.P., *Numerical Simulation of Reactive Flow*, 2<sup>nd</sup> Ed., Cambridge University Press, 2001
- [90] Bryant, R., Womeldorf, C., Johnsson, E., Ohlemiller, T., *Fire Mater.* 27 (2003), 209-222
- [91] Currie, I.G., *Fundamental Mechanics of Fluids*, 2<sup>nd</sup> Ed., McGraw-Hill, 1993
- [92] Libby, P.A., Williams, F.A., *Turbulent Reacting Flows*, Academic Press, London, 1994
- [93] Paschedag, A.R., *CFD in der Verfahrenstechnik*, WILEY-VCH Weinheim, 2004
- [94] Görner, K., *Technische Verbrennungssysteme*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 1991
- [95] *CFX Solver Theory*, Benutzerhandbuch, Version 5.7.1, Stand Feb. 2005
- [96] Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R.W., *Verbrennung*, 3. Auflage, Springer, Berlin Heidelberg, 2001
- [97] Hinze, J.O., *Turbulence*, McGraw-Hill Pub. Co., New York, 1975
- [98] Prandtl, L., *Z. angew. Math. u. Mech.* 5 (1925), 136-139
- [99] Jones, W.P., Launder, B.E., *J. Heat Mass Transfer* 15 (1972), 301-314
- [100] Launder, B.E., Spalding, D.B., *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 3 (1974), 269-289
- [101] Launder, B.E., Reece, G.J., Rodi, W., *J. Fluid Mechanics* 68 (1975), 537-566
- [102] Speziale, C.G., Sarkar, S., Gatski, T.B., *J. Fluid Mechanics* 277 (1991), 245-272
- [103] Magnussen, B.F., Hjertager, B.H., *16<sup>th</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1976), The Combustion Institute, Pittsburgh, 719-729
- [104] Magnussen, B.F., *The Eddy Dissipation Concept for Turbulent Combustion Modelling. Its Physical and Practical Implications*, Presented at the First Topic Oriented Technical Meeting, International Flame Research Foundation, Amsterdam, The Netherlands, 1989
- [105] Mineralölwirtschaftsverband e.V., *Aus der Sprache des Öls*, 12. überarbeitete Auflage, Hamburg, 2001
- [106] Wehrwissenschaftliches Institut für Werk-, Explosiv- und Betriebsstoffe (WIWEB), *Tribologie/Betriebsstoffe* (2004), Online im Internet: <http://www.bwb.org/c1256df2004ff94c/currentbaselink/n25t8cdm988ishrde>, 2005
- [107] Agenca for Toxic Substances and Disease Registry, *Toxocological Profile for Jet Fuels JP-5 and JP-8* (2001), Online im Internet: [www.atsdr.cdc.gov/toxprofiles/tp121.html](http://www.atsdr.cdc.gov/toxprofiles/tp121.html), 2005
- [108] Karbach, V., Muharam, Y., Riedel, U., Schramm, B., Warnatz, J., *Reaktionsmechanismen der Verbrennung flüssiger Kohlenwasserstoffe* (2004), Online im Internet: [http://reaflow.iwr.uni-heidelberg.de/~riedel/papers/2004\\_COSI-Paper.pdf](http://reaflow.iwr.uni-heidelberg.de/~riedel/papers/2004_COSI-Paper.pdf), 2005
- [109] Riesmeier, E., Honnet, S., Peters, N., *Flamelet Modeling of Pollutant Formation in a Gas Turbine Combustion Chamber using Detailed Chemistry for a Kerosene Model Fuel*, Proceedings of the 2002 Fall Technical Conference of the ASME Internal Combustion Engine Division, ICE-Vol. 39 (2002), 149-157
- [110] Magnussen, B.F., *Modelling of NO<sub>x</sub> and Soot Formation by the Eddy Dissipation Concept*, Presented at the First Topic Oriented Technical Meeting, International Flame Research Foundation, Amsterdam, The Netherlands, 1989

- [111] Peters, N., Paczko, G., Seiser, R., Seshadri, K., *Comb. Flame* 128 (2002), 38-59
- [112] Tesner, P.A., Snegirova, T.D., Knorre, V. G., *Comb. Flame* 17 (1971), 253-260
- [113] Leung, K.M., Lindstedt, R.P., Jones, W.P., *Comb. Flame* 87 (1991), 289-305
- [114] Fairweather, M., Jones, W.P., Lindstedt, R.P., *Comb. Flame* 89 (1992), 45-63
- [115] Miller, J.H., Mallard, W.G., Smyth, K.C., *22<sup>st</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1986), The Combustion Institute, Pittsburgh, 1057-1065
- [116] Kent, J.H., Wagner, H. G., *Comb. Flame* 47 (1982), 53-65
- [117] Liu, F., Guo, H., Smallwood, G.J., Gülder, Ö.L., *Combust. Theory Modelling* 7 (2003) 301-315
- [118] Nagle, J., Strickland-Constable, R.F., *Proc. 5<sup>th</sup> Carbon Conference* 1 (1962), 1-62
- [119] Menter, F., Raumdiskretisierung: Approximation konvektiver und diffusiver Flüsse, präsentiert in *Kurzlehrgang NUMET 2002*, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, Universität Erlangen, 2002
- [120] ANSYS ICEM CFD, Benutzerhandbuch, Version 5.1, Stand Februar 2005
- [121] Chatris, J.M., Quintela, J., Folch, J., Planas, E., Arnaldos, J., Casal, J., *Comb. Flame* 126 (2001), 1373-1383
- [122] Koseki, H., Mulholland, G.W., Jin, T., Study on Combustion Property of Crude Oil - A Joint Study Between NIST/CFR and FRI, *Eleventh Joint Panel Meeting of the UJNR Panel on Fire Research and Safety*. Online im Internet: <http://www.mms.gov/tarprojects/026.htm>, 2006
- [123] Magnussen, B.F., Hjertager, B.H., *16<sup>th</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1977), The Combustion Institute, Pittsburgh, 719-732
- [124] Lee, S.C., Tien, L., *18<sup>th</sup> Symp. (Int.) Comb.* (1981), The Combustion Institute, Pittsburgh, 1159-1166
- [125] Felske, J.D., Tien, C.L., *Combust. Sci. Tech.* 7 (1973), 25-31
- [126] Smyth, K.C., Shaddix, C.R., *Comb. Flame* 107 (1996), 314-320
- [127] Kaplan, C.R., Baek, S.W., Oran, E.S., Ellzey, J.L., *Comb. Flame* 96 (1994), 1-21
- [128] Oberkampf, W.L., Barone, M.F., *J. Comp. Phys.* 217 (2006), 5-36
- [129] Kanury, A.M., *Introduction to Combustion Phenomena*, 4th Ed., Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1984
- [130] Schönbacher, A., in *Schwere Gase und Sicherheitsanalyse - IV* (Hartwig, S. (Ed.)), Batelle-Eigenverlag, Frankfurt Main, 1992
- [131] Gwehenberger, J., Mayer, H., Matzarakis, A., *TÜ 40*, 11 (1999), 52-57
- [132] *Report on Burning of Petroleum Fires*, Japan Institute for Safety Engineering, 1982
- [133] Koseki, H., Radiation Properties and Flame Structure of Large Hydrocarbon Pool Fires, *Thirteenth Meeting of the UJNR Panel on Fire Research and Safety*, Vol. 2, March 13-20, 1996
- [134] Tieszen, S.R., O'Hern, T.J., Schefer, R.W., Weckman, E.J., Blanchat, T.K., *Comb. Flame* 129 (2002), 378-391
- [135] DesJardin, P.E., O'Hern, T.J., Tieszen, S.R., *Phys. Fluids* 16, 6 (2004), 1866-1883



- [136] Tieszen, S.R., Vernon, F.N., Gritzo, L.A., Holen, J.K., Murray, D., Moya, J.L., *Vortical Structures in Pool fires: Observation, Speculation and Simulation*, Sandia Report SAND96-2607, Sandia National Laboratories, Livermore, 1996
- [137] Brötz, W., Scheller, V., Kettler, A., Schönbucher, A., *Comb. Flame* 37 (1980), 1-24
- [138] Schönbucher, A., Wärme-, Stoff- und Impulstransportvorgänge unter besonderer Berücksichtigung kohärenter Strukturen in Tankflammen organischer Flüssigkeiten, *Fortschr.-Ber. VDI-Z.* 6, 83 (1981)
- [139] Gawlowski, M., Göck, D., Kuhr, C., Vela, I., A. Schönbucher, 8. *Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit* (2006), Köthen, GVC.VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen



# Lebenslauf

Christian Kuhr

Geburtstag	03.01.1971
Geburtsort	Hengelo, Niederlande
Staatsangehörigkeit	deutsch

## Ausbildung

### Schulischer Werdegang

1977 - 1981	Gemeinschaftsgrundschule Annastr. in Moers
1981 – 1990	Gymnasium Adolfinum in Moers, Abschluß mit Abitur

### Berufsausbildung

08/1990 – 01/1993	Ausbildung zum Chemikanten bei der Bayer AG, Werk Uerdingen; um 6 Monate vorgezogene Abschlussprüfung
-------------------	-------------------------------------------------------------------------------------------------------

### Studium

10/1993 – 01/2000	Studium der Chemie an der Gerhard-Mercator-Universität Duisburg  Diplomarbeit: Transiente Felder der Strömungsgeschwindigkeit, Vortizität und Zirkulation in großen JP4-Poolflammen
-------------------	-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

## Wehrersatzdienst

04/1993 – 03/2000	Helfer in der Bundesanstalt Technisches Hilfswerk (THW), Moers
-------------------	----------------------------------------------------------------

## Beruflicher Werdegang

01/1993 – 08/1993	Chemikant Bayer AG, Werk Uerdingen
12/1994 – 10/2001	Selbständige Tätigkeit Multimedia Soft Moers, Einzelhandelsgeschäft
02/2000 – 12/2002	Wissenschaftlicher Mitarbeiter Gerhard-Mercator-Universität Duisburg, Institut f. Technische Chemie
01/2003 – 09/2005	Wissenschaftlicher Mitarbeiter Universität Duisburg-Essen, Institut f. Technische Chemie I, Campus Essen
seit 04/2006	CFD-Ingenieur Hitachi Power Europe GmbH, Duisburg



## Publikationsliste

- [1] Kuhr, C., *Transiente Felder der Strömungsgeschwindigkeit, Vortizität und Zirkulation in großen JP4-Flammen*, Diplomarbeit, Universität Duisburg, 2000
- [2] Kuhr, C.; Leitzke, A.; Opitz, D.; Müller, R.H.G.; Schönbucher, A.: Transient fields of flow velocity and vorticity of pool fires calculated from interference fringe patterns with the FPC-method, *International Meeting on Chemical Engineering, Environmental Protection and Biotechnology, AICHEMA 2000*, 116/118
- [3] Kuhr, C.; Opitz, D.; Müller, R.H.G.; Schönbucher, A.: Transiente Geschwindigkeiten und Vortizitäten von Hot Spots und Rußballen an der Oberfläche großer Poolflammen, *5. Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit*, GVC.VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, 2000, 311-318
- [4] Kuhr, C.; Opitz, D.; Müller, R.H.G.; Schönbucher, A.: Instantaneous velocity fields and vorticity distribution of the movement of coherent structures at the surface of large-scale JP4-pool fires; *Proceedings of the 10<sup>th</sup> International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries*, 19-21 June 2001, Stockholm, Sweden, 1179-1188
- [5] Kuhr, C.; Staus S.; Koch, T.; Schönbucher, A.: Zur Modellierung der Wärmestrahlung von Poolflammen, *VDI-Ber.* 1629, 2001, 551-556
- [6] Kuhr, C.; Schönbucher, A.: CFD-Modellierung großer Poolflammen mit der Software CFX-4, *100. Bunsentagung*, Stuttgart 24.-26.05.2001, 159
- [7] Kuhr, C.; Schönbucher, A.: CFD-modeling of large-scale pool fires, *Electronic Proceedings of 3<sup>rd</sup> European Congress of Chemical Engineering (ECCE)*, Nürnberg 26.-28.06.2001 und *Chem.-Ing.-Tech.* 73, 2001, 638-639
- [8] Kuhr, C.; Schönbucher, A.: Simulation zeitabhängiger Bestrahlungsstärken eines Kerosin-Schadenfeuers, *GVC/DECHEMA-Jahrestagungen 2002*, 11.-13. Juni 2002, Wiesbaden
- [9] Kuhr, C.; Schönbucher, A.: CFD-modellierte Geschwindigkeitsfelder in nicht-vorgemischten großen Kerosin-Flammen, *101. Hauptversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie*, 09.-11. Mai 2002, Potsdam, P 127

- [10] Kuhr, C.; Schönbucher, A.: Messung und Modellierung zeitabhängiger Bestrahlungsstärken sicherheitsrelevanter Kerosin-Schadenfeuer verschiedener Durchmesser, P14, 6. *Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit*, 07./08. November 2002, Köthen
- [11] Kuhr, C.; Schönbucher, A.: Zur Festlegung von Abständen zwischen Industrieanlagen und Schutzobjekten für das Ereignis Lachenbrand, C04; 6. *Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit*, 07./08. November 2002, Köthen
- [12] Kuhr, C.; Schönbucher, A.: Simulation zeitabhängiger Bestrahlungsstärken eines Kerosin-Schadenfeuers, *Chem.-Ing.-Tech.* 74, 2002, 618
- [13] Kuhr, C.; Staus, S.; Schönbucher, A.: Modelling of the thermal radiation of pool fires, *Progress in Computational Fluid Dynamics* 3 (2-4), 2003, 151
- [14] Vela, I.; Kuhr, C.; Schönbucher, A.: CFD-Modelling of Large-Scale Kerosene Pool Fires; *11<sup>th</sup> International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industry*, 2004, Prag, Tschechische Republik
- [15] Vela, I.; Kuhr, C.; Schönbucher, A.: Simulation of large open hydrocarbon fires with cross-wind, *GVC/DECHEMA-Jahrestagungen* 2004, 12.-14. October 2004, Karlsruhe
- [16] Vela, I.; Kuhr, C.; Schönbucher, A.: 3D-simulation of large pool fires using ANSYS CFX, *Workshop on Heat Transfer in Pool Fires*, 12.-13. April 2005, Livermore, USA
- [17] Vela, I.; Kuhr, C.; Schönbucher, A.: Validation of the semi-empirical radiation model OSRAMO II, *Workshop*, 12.-13. April 2005, Livermore, USA
- [18] Vela, I.; Kuhr, C.; Schönbucher, A.: Dissipative Structures in Tank Flames – an experimental study of the dynamic behaviour using several methods, e.g. the holographic real-time interferometry, *Workshop*, 15.-16. April 2005, Salt Lake City, USA
- [19] Vela, I.; Kuhr, C.; Schönbucher, A.: 3D-simulation of large pool fires using ANSYS CFX, *Workshop*, 15. April 2005, Salt Lake City, USA